

***Simulación de una combustión de Gas Natural
en un entorno Linux mediante CFD Fluent***

Resumen

Los **programas de simulación** son una herramienta cada vez más extendida a la hora de planificar proyectos de ingeniería. En el caso de la **Ingeniería Química**, como los demás campos de la ciencia, no escapa ni debe escapar de esta dinámica ya que estos programas nos son muy útiles a la hora de abaratar costes en un proyecto de cualquier índole.

Con el fin de evaluar una de estas herramientas informáticas, se planteó el proyecto que esta memoria trata de describir. La idea principal era la de evaluar el comportamiento del programa **FLUENT** en una prueba elegida convenientemente, la de un **quemador de gas natural**, y contrastar los resultados con las expectativas creadas por el conocimiento teórico adquirido previamente.

Se puede avanzar que las pruebas fueron más que satisfactorias, pero que se echó en falta la posibilidad de contrastar los resultados virtuales con experimentos físicos. Esta pudiera y debiera ser la base de un nuevo proyecto en un futuro cercano.

Las pruebas realizadas en el nuevo hardware adquirido, debido a la potencia requerida por el software, también tuvo una buena respuesta. Permitiendo hacer cálculos de volúmenes con un gran número de mallas.

Durante la realización de este proyecto se adquirió experiencia en entornos **Linux** ya que el Hardware era el idóneo para este Sistema Operativo y de hecho éste ya lo incorporaba desde que se desempaquetó. Fue una gran oportunidad de mejorar la formación relacionada con las herramientas informáticas.

Las pruebas al simulador dieron pie a estudiar el caso escogido más a fondo y plantear nuevos objetivos. Así surgió el estudio sobre la **formación de NOx** y las formas de reducir dicha producción de gases nocivos para el medio ambiente. El paquete de simulación para la formación de NOx forma parte de un paquete más grande de FLUENT relacionado con el medio ambiente que sería interesante probar por las posibilidades que ofrece.



0. Índice

Resumen	1
0. Índice	3
1. Glosario.....	7
2. Introducción	11
2.1. Objetivos	11
2.2. Alcance del proyecto.....	12
2.3. Resumen de la memoria.....	12
2.4. Requisitos previos	13
3. Preliminares a la simulación	15
3.1. Selección e instalación de los dispositivos físicos	15
3.1.1. Workstation y sus dispositivos.....	15
3.1.2 Ubicación y acondicionamiento	18
3.2. Selección e instalación del Software.....	20
3.2.1. Entorno Linux	20
3.2.2. Femlab	26
3.2.3. Fluent-Gambit	27
4. Simulación de una combustión de Gas Natural	29
4.1. Adaptación al entorno	29
4.1.1. CFD	30
4.1.2. Fluent	32
4.1.3. Estudio del mallado mediante Gambit (2D vs 3D)	34



4.2. Realización de la simulación	42
4.2.1. Descripción del problema	43
4.2.2. Requisitos previos	44
4.2.3. El modelo y la ecuación utilizados	44
4.2.4. Realización de la malla	45
4.2.5. Fundamentos del flujo de fluidos	51
4.2.6. Elección del modelo	57
4.2.7. Materiales	58
4.2.8. Condiciones de contorno	60
4.2.9. Metodología para obtener resultados	63
4.2.10. Resultados	64
4.2.11. Predicción de la formación de NO _x	71
4.3. Estudio de la formación de NO _x	73
4.3.1. Verificación de la temperatura de llama.....	73
4.3.2. Formación NO _x	80
5. Estudio Económico	117
5.1. Cálculo de la inversión.....	117
5.2. Ingresos generados	121
5.3. Balance económico. Cuenta de resultados.....	122
5.4. Cálculo estimativo del coste de este proyecto	123



6. Conclusiones	125
6.1. Conclusiones generales	125
6.2. Conclusiones sobre un caso práctico: Formación del NOx.....	126
6.3. Líneas de continuación.....	128
6.4. Valoración personal	128
Agradecimientos.....	129
Bibliografía	131
Anexos	Vol II
A. Componentes Informáticos, Software y Hardware	1
B. Acondicionamiento Térmico de la sala	11
C. Combustión.....	23
D. Cinética del NOx.....	31
E. El modelo de Fluent	45
F. Tipos de quemadores	55
G. Presupuesto	79
H. Planificación del Proyecto	83



1. Glosario

Símbolo	Descripción	Unidades
C_p	Capacidad calorífica a presión constante	J/kg·°K
$\langle C_p^0 \rangle_H$	Capacidad calorífica total de la corriente	J/kg·°K
D	Diámetro	m
D_H	Diámetro Hidráulico	m
D_{ij}, D	Coeficiente de difusión de masa	m ² /s
E_a	Energía de activación	
F	Vector fuerza	N
g	Aceleración gravitacional	m/s ²
G	Generación energía de la turbulencia cinética	
H	Entalpía total (energía / masa)	J
h	Coeficiente de transferencia de calor	W/m ² °K
h	Entalpía de cada especie	J
J	Flujo masa, flujo de difusión	kg/m ²
K	Constante de equilibrio	(varias)
k	Energía cinética de turbulencia	m ² /s ²
k	Constante de reacción, $k_1, k_{-1}, k_{f,r}...$	(varias)
k_c	Coeficiente transferencia de masa	(varias)
L, l	Longitud	m
m	Masa	kg
\dot{m}	Flujo másico	kg/s
M_w	Media Peso Molecular	kg/kgmol
p	Presión	Pa
ppm	Partes por millón	
Q	Flujo de entalpía	W
q	Flujo calorífico	W/m ²
R	Factor neto de formación de especies	
r	Radio	m
S	Entropía total	J/Kmol°K
s	Entropía de cada especie	J/kmol°K
T	Temperatura	°K, °C
t	Tiempo	s
U, v, w	Velocidad	m/s
V	Volumen	m ³
X	Fracción molar	adimensional
Y	Fracción másica	adimensional
Números Adimensionales		
Le	Número de Lewis	adimensional
Nu	Número de Nusselt	adimensional
Pe	Número de Peclet	adimensional
Pr	Número Prandtl	adimensional
Re	Número de Reynolds	adimensional
Sc	Número Schmidt	adimensional



Símbolos Griegos		
<i>a</i>	Fracción volumen	adimensional
<i>b</i>	Coeficiente de expansión térmica	K ⁻¹
Δ	Cambio en una variable, final-inicial	
<i>d</i>	Función delta	(varias)
<i>e</i>	Factor de disipación de la turbulencia	m ² /s ³
<i>h</i>	Factor efectividad	adimensional
<i>hⁱ, h^{''}</i>	Factor de exponentes para reactivos, productos	adimensional
<i>m</i>	Viscosidad dinámica	cP
<i>u</i>	Viscosidad cinemática	m ² /s
<i>u['], u^{''}</i>	Coeficiente estequiométrico para reactivos, productos	adimensional
<i>r</i>	Densidad	kg/m ³
<i>s</i>	Tensión superficial	kg/m
<i>τ</i>	Tensor de tensiones	Pa
∂	Derivada parcial	
∇	Gradiente	
<i>l</i>	Longitud de onda	A
<i>p</i>	Pi (constante)	3,14159
SIGLAS		
CAD	Computer Aided Design (Diseño dibujo por ordenador)	
CFD	Dinámica de fluidos computacional	
FD	Diferencias finitas	
FE	Elementos finitos	
FV	Volumen finito	
FGR	Recirculación gases escape	
HW	Hardware	
PDEs	Ecuaciones diferenciales de derivadas parciales	
SO	Sistema Operativo	
SW	Software	
WS	Workstation (Estación de trabajo)	
EVALUACIÓN ECONÓMICA		
VAN	Valor actualizado neto (CF: Cash Flow)	CF/(1+i) ⁿ
TIR	Tasa interna de rentabilidad	Cuando VAN=0
PB	Payback. Periodo de retorno o término de recuperación	
ANEXO COMBUSTIÓN		
A_{min}	Volumen aire mínimo	m ³
A_p	Coeficiente atenuación	
d_i	Coeficiente difusividad	m ² /s
L	Longitud de llama	m
L_m	Límite mezcla	
L_j	Límite inflamabilidad	
PCI	Poder calorífico inferior	kJ/m ³
PCS	Poder calorífico superior	kJ/m ³
Q	Calor que se desprende	J
T_f	Temperatura llama	°K
x_j	Fracción molar componente i	
h	Rendimiento combustión	



ANEXO QUEMADORES		
G	Impulsión	N
Q_m	Caudal másico fluido	kg/s
P_e	Presión entrada inyector	Pa
P_s	Presión salida inyector	Pa
S_s	Sección salida inyector	m ²
V_s	Velocidad fluido salida inyector	m/s
ANEXO CINÉTICA NOx		
°F	Grados Fahrenheit	°F
K_p	Constante de equilibrio	cm ³ /g·mol
M	Cuerpo que no reacciona	
p	Presión parcial	Pa
Y	Fracción NO formada con el tiempo t en términos parámetro C y M	
g	Relación equivalencia combustible y aire	
ANEXO REFRIGERACIÓN		
H	Calor transmitido	W
A	Área de la superficie expuesta	m ²
t_i	Temperatura del aire interior	°C
t_0	Temperatura del aire exterior	°C
U	Coeficiente global de transmisión de calor	W/m ² °C
X	Espesor del material	m
K	Conductividad térmica	W/m ² °C
f_i	Conductancia superficial de tabique inferior	W/m ² °C
f_0	Conductancia superficial de muro exterior	W/m ² °C
C= K/X	Conductancia	W/m ² °C
R = X/K =1/C	Resistencia Térmica o resistividad	m ² °C/ W
H₂	Pérdida de calor	W
s	Calor específico del aire	sxd= 0,709
d	Peso específico del aire	kJ/m ³
n	Número de renovaciones aire por hora	
V	Volumen local	m ³
F	Factor de radiación- porcentaje de radiación solar que se transmite al interior (F=1 para vidrio)	
a	Coeficiente de absorción – porcentaje de radiación incidente que se absorbe en la superficie	
J	Intensidad de radiación solar que incide en la superficie	W/m ²



2. Introducción

En el campo de la Ingeniería Química, como actualmente en muchos otros, un estudio previo de los equipos y procesos que intervienen en un sistema puede ahorrarnos un gran esfuerzo en términos económicos y de tiempo.

Dentro de las herramientas disponibles para realizar dicho estudio, probablemente sean los paquetes de simulación informáticos los que mejor rendimiento, tanto en el tiempo, como en lo económico, nos den. Este es un campo de la Ingeniería que está avanzando a pasos agigantados de forma paralela a los avances realizados en el ámbito de la informática, desde que se produjo el desarrollo de ordenadores de mayor capacidad de procesamiento, que permitieron realizar estudios que antes eran impensables.

Con el propósito de estudiar y evaluar una de estas “nuevas” herramientas, se decidió realizar una simulación de un equipo industrial (en este caso un quemador de gas natural) y evaluar los resultados obtenidos. Dicha evaluación sería mediante una comparativa con los resultados teóricos esperados.

2.1. Objetivos

Los objetivos de este proyecto son:

- ❑ **Evaluar los resultados obtenidos por FLUENT** (Software de simulación) contrastándolos con los resultados teóricos esperados.
- ❑ **Evaluar el comportamiento de la simulación y esfuerzo realizado por la estación de trabajo.**
- ❑ Como objetivos adicionales añadidos durante el desarrollo del proyecto, pero no por ello menos importante encontramos los siguientes puntos:
 - **Estudio de la formación de NO_x**
 - **Aplicar los conocimientos adquiridos durante la simulación** del quemador para mejorar los resultados en un caso específico, el de **la formación de NO_x en la combustión de gas natural**, es decir, estudiar diversos parámetros que intervienen y comprobar cuando se minimiza esta formación.



2.2. Alcance del proyecto

Una vez cumplidos los objetivos del proyecto, este trabajo puede dar pie a estudiar sistemas y equipos industriales para minimizar el impacto medioambiental sin perjuicio para el rendimiento.

Al tratarse de simulaciones por ordenador, dichos estudios serían a muy bajo coste con lo que se evitaría, al menos en principio, el rechazo de las empresas ya que este estudio podría incluso mejorar sus beneficios ya sea mejorando la producción, ya sea evitando sanciones medioambientales.

Ya en el ámbito universitario, este puede ser el primero de diversos estudios, tanto simulados como empíricos (para demostrar la fiabilidad de los primeros).

2.3. Requisitos

Como es evidente, no puede existir un estudio sobre un paquete de simulación sin dicho paquete. Pero la elección de este paquete no ha sido aleatoria. Se seleccionó un paquete puntero en la actualidad **Fluent** y pionero en el Departamento de Reactores de la Universidad Politécnica de Cataluña. Este nuevo material informático requirió de una instalación y adaptación del proyectista.

La potencia del Software necesita de un Hardware acorde a las necesidades del primero. Así pues, se adquirió y preparó una nueva estación de trabajo o Workstation. Dicha Workstation fue provista de todo el Software adicional amén del paquete de simulación. El sistema operativo elegido para soportar el proyecto fue Linux, un Software libre cada vez más extendido por ser gratuito y tener mejor comportamiento que los sistemas basados en windows.

Así pues, al tratarse de un entorno de trabajo totalmente nuevo, tanto en los paquetes más comunes como puede ser el editor de textos hasta el paquete de simulación, es imprescindible una pequeña fase de adaptación al material.

Por último, toda la información bibliográfica, tanto la teórica como la referente al comportamiento de Fluent, es requisito imprescindible para realizar la comparativa de resultados de la simulación con los teóricos.

2.4. Resumen de la memoria

La memoria de este proyecto intenta seguir en sus diferentes capítulos la evolución y desarrollo del estudio de la simulación. Pero antes de dicha explicación se encuentra un **resumen**, un **índice** y un **glosario** para ayudar y orientar al lector.

En el capítulo dos, **Introducción**, se procede a explicar el planteamiento del proyecto y las causas que indujeron a su realización. También se mencionarán, como ya se ha visto, los requisitos para realizar el proyecto y los posibles ámbitos de uso del material y documentación obtenida tras este estudio.

Ya en el capítulo tres, **Pasos previos a la simulación**, se explicarán todos los pasos anteriores a la simulación tales como la selección e instalación del material (tanto Hardware como Software). Dentro de los pasos previos se comentará también la adaptación al entorno Linux.

Tras los Pasos previos, en el capítulo cuatro, **Simulación de una combustión de gas natural**, se explicará el desarrollo de dicha simulación desde su planteamiento hasta la obtención de sus resultados. Es en este punto donde aparecen los objetivos relacionados con la formación de NOx. En este caso también se haya una breve descripción de la fase de aclimatación a este paquete de simulación.

En el capítulo cinco o **Estudio económico**, se tratará de realizar unos cálculos estimativos de la realización de un proyecto empresarial basado en el estudio de industrias para mejorar sus condiciones medioambientales y de rendimiento.

Para finalizar, en el capítulo seis, **Conclusiones**, se comentarán los resultados de las evaluaciones obtenidos tras el desarrollo de todo el proceso. Se evaluará todo el material (Hardware y Software) y el funcionamiento del simulador en un caso concreto, la reducción de la formación de NOx. También se dará una valoración personal del proyecto y unas líneas de continuación a seguir, si se cree conveniente, tras la conclusión de este trabajo.

La memoria no puede finalizar sin una **Bibliografía** y unos **Anexos** destinados a complementar la información ofrecida en este documento.



3. Preliminares a la simulación

El desarrollo del proyecto requiere de las herramientas adecuadas. En este caso, para la realización de la simulación de un quemador de gas natural y el estudio de la formación de NOx en éste, contamos con dos posibilidades Fluent y Femlab.

La primera de estas opciones, FEMLAB, ya se encontraba instalada y en funcionamiento en el departamento de Ingeniería Química. La segunda y más apetecible de las opciones por su novedad era el programa conocido como FLUENT. Finalmente, FLUENT fue la opción escogida.

Del mismo modo que se debe escoger el Software adecuado también será importante escoger la base Hardware sobre la que se ejecutarán dichos programas.

3.1. Selección e instalación de los dispositivos físicos

En este capítulo se comentarán los dispositivos físicos necesarios para este proyecto, en este caso fue necesario seleccionar e instalar una estación de trabajo para poder trabajar en ella con el simulador escogido.

Antes de poder realizar su instalación fue necesario una preparación del habitáculo donde permanecería la WS; realizando un estudio de la refrigeración necesaria para que la estación de trabajo se encontrase en las condiciones óptimas para poder trabajar.

3.1.1. Workstation y sus dispositivos

A continuación se comentará los pasos seguidos hasta llegar a la elección final del hardware escogido para realizar el proyecto.

❑ Elección y preparación del Hardware.

Como paso previo a la realización del proyecto basado en la utilización y prueba del Software conocido como FLUENT se necesitaba escoger el soporte adecuado para que este programa funcionase adecuadamente.

De entre las muchas opciones que el mercado ofrecía se extrajeron dos posibilidades que analizaremos a continuación. La primera opción era la workstation de DELL [1] basada en la tecnología Intel. La segunda opción que se barajaba era la proporcionada por SUN con tecnología AMD. En ambos casos, las máquinas cumplían las especificaciones que el Software FLUENT requería. Así pues sólo quedaba compararlas entre sí.

Para realizar la comparativa se realizaron diversas pruebas con el programa SPEC. Dicho programa nos permitió comprobar la velocidad y rendimiento de ambos procesadores. SPEC es un Software que tras realizar diversas pruebas, nos proporciona



una estimación de lo bueno que es un procesador y una máquina dependiendo de diversos tipos de operaciones. En las siguientes gráficas podremos ver los resultados de dichas pruebas:

	SPECint2000	SPECfp2000	SPECint_rate2000	SPECfp_rate2000
AMD Opteron: Procesador para la máquina SUN				
Single Opteron 246, 2.0GHz	1260	1235	14.3	14.0
Dual Opteron 246, 2.0GHz			28.2	29.9
Intel Xeon : Procesador para la máquina HP i DELL				
Single Xeon 3.2GHz, 1MB L3 Cache	1319	1202	15.3	14.0
Dual Xeon 3.2GHz, 1MB L3 Cache			27.9	19.7

Tabla 3.1. Comparativa realizada con SPEC entre di versas máquinas.

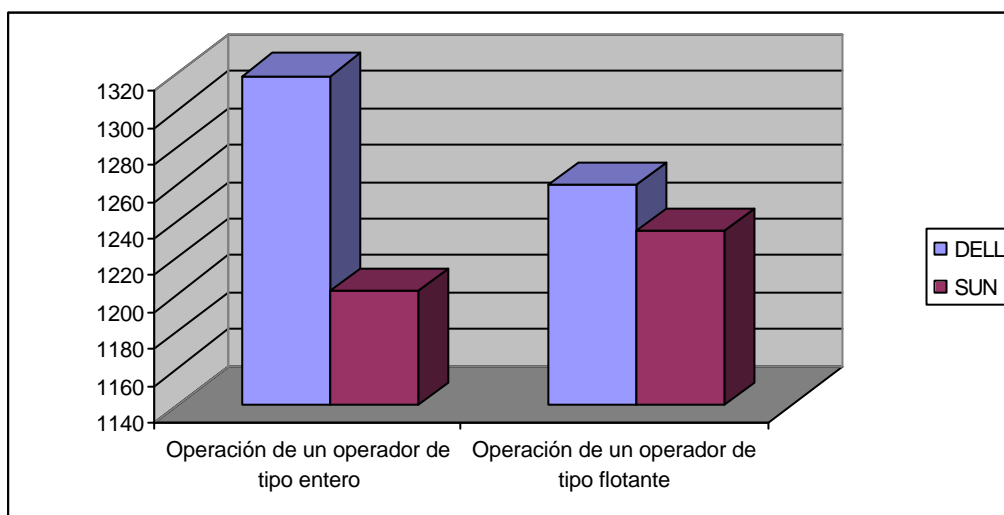


Ilustración 3.1. Comparación en la realización de operación de un operador de diferentes tipos.

Dichas pruebas son de tipo empírico y por lo tanto, los datos pueden sufrir pequeñas alteraciones si se vuelven a realizar.

Los resultados demuestran que pese a que la máquina de SUN tiene un procesador mucho más “lento” con una velocidad de 2.0 GHz el conjunto de la máquina es en general un poco mejor que la máquina de DELL a 3,2 GHz. La explicación radica en que el funcionamiento de cualquier equipo informático suele venir condicionado por las características de los peores dispositivos. En especial cabe destacar que es mejor para las operaciones con operadores de tipo punto flotante. En el ilustración 3.2 podemos ver esta característica. La máquina de DELL destaca en las operaciones de tipo entero de un solo operador. Pero estas operaciones serán escasas en FLUENT.



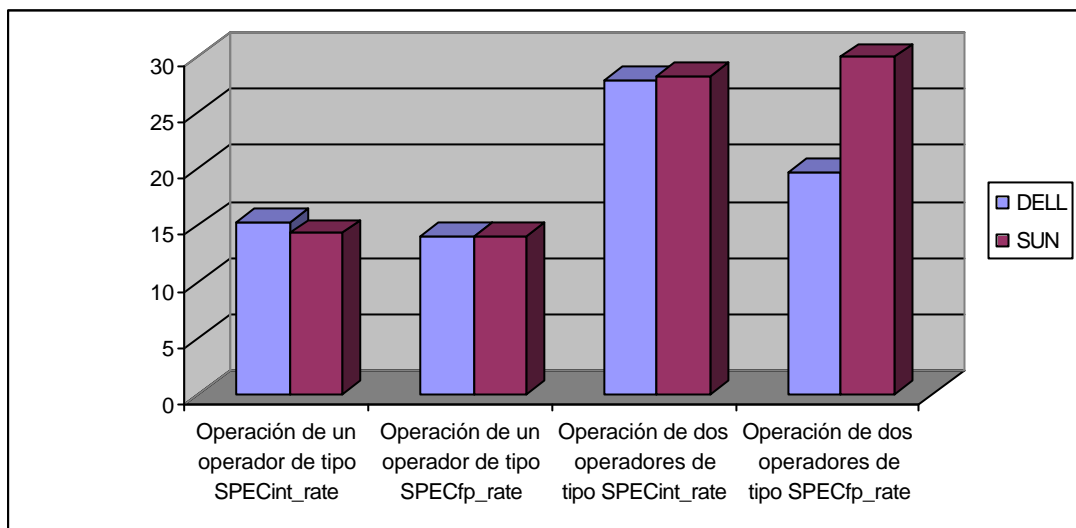


Ilustración 3.2. Varias Comparaciones entre las máquinas DELL y SUN.

Así pues las pruebas realizadas con SPEC aconsejarían la utilización de la máquina de SUN, una de las más comunes y fiables del mercado. Pese a todo esto, la elección final vino marcada por otro factor importante: el económico. Al estar ambas máquinas tan igualadas (SUN sólo destaca claramente en una de las pruebas) el factor económico fue el decisivo, máxime cuándo la utilización de FLUENT no iba a ser exhaustiva. Es en este último y decisivo punto en el que la elección se decantó por la máquina de DELL.

Finalmente la elección final se trata de una máquina **DUAL con dos procesadores Xeon a 3,2 Gb** y que tiene una cantidad de **memoria RAM de 4Gb**. [2]

❑ Estación de trabajo seleccionada:

Se ha considerado importante reseñar las principales características de la máquina escogida, que será la workstation que se utilizará para la realización de este proyecto:



Ilustración 3.3. Workstation utilizada.

La descripción técnica de la workstation se encuentra a continuación y se puede ver también en el pedido y factura de ésta que se encuentra en los Anexo A y G.

Descripción
Precision 670 N-Series MiniTower - Dual Xeon 3.2GHz/1MB, Floppy
4GB DDR2 400 ECC Dual Channel Memory (2x1GB 1-R & 2x1GB 2-R)
Disquetera 3.5" 1.44 MB
73GB (15,000rpm)SCSI U320 Hard Drive
(Non-RAID) SCSI Controller
48X/32X DVD/CDRW Combo Drive NO Software
(Non RAID) SCSI Cable for 1 or 2 Hard Drives
FP/MG - Euro – 17in (1704FP HAS TCO99) UltraSharp Midnight Grey Flat Panel
256MB PCI-E NVIDIA FX3400 (HEGA)

Tabla 3.2. Descripción de las características técnicas de la Workstation. [1]

3.1.2 Ubicación y acondicionamiento

□ Ubicación de la WS.

Debido a las propias características inherentes a la WS la ubicación de este Hardware dentro del despacho no fue un asunto trivial. A parte de la elección de su localización física y de las “obras” necesarias para hacer posible ésta, hubo que tener en consideración la refrigeración de la sala.

Para este último asunto se hizo un cálculo estimativo de las frigorías necesarias para mantener estable la temperatura dentro de la sala y permitir así el buen funcionamiento de nuestro sistema. Este cálculo se basa en los siguientes apartados, que ampliamente se pueden ver especificados en el Anexo B. [3]

- **Transmisión normal de calor a través de paredes, ventanas, techos,...** Considerando el diferente dimensionado de cada superficie, así como los diferentes materiales que lo forman: $H_1 = AU(t_i - t_0)$
- **Transmisión de la radiación solar:** consideramos que la radiación se produce a través de vidrio simple con una inclinación de 90°C, en Barcelona, así como el área de la ventana en la que incide y sus protecciones: $H_2 = A \cdot F \cdot a \cdot J$
- **Emisión de calor por parte de los ocupantes:** Se considera aire quieto y tres ocupantes fijos en la sala.
- **Calor introducido por infiltración y ventilación.** $H_2 = s.d.n.V(t_0 - t_i)$
- **Emisión de calor por parte de los aparatos:** En este apartado se considera la radiación emitida por los ordenadores, fluorescentes y otros aparatos eléctricos.

Para calcular la carga de refrigeración total consideramos un COP de 3 y obtenemos que la carga necesaria para esta habitación, bajo estas condiciones sea de **5931,07 Frigorías/h.**



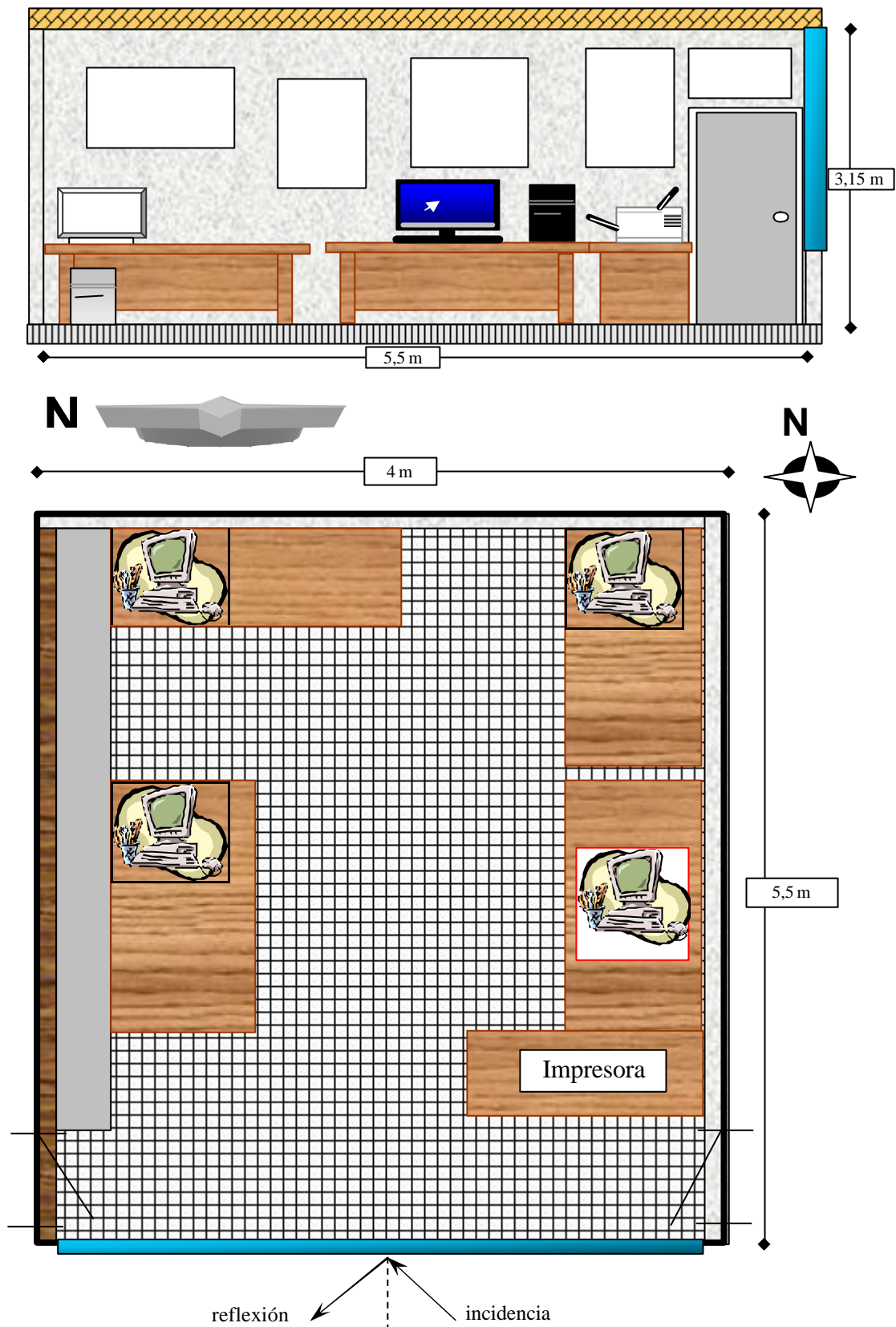


Ilustración 3.4. Mapa habitación donde se realizó el proyecto: Dep. Reactores (Pabellón G-2)

3. Preliminares a la simulación



3.2. Selección e instalación del Software.

En este caso se comentarán las características de los dos programas que se instalaron en la Workstation ya que ambos eran aptos para la realización de este proyecto, ya que ambos comparten la misma base de cálculo (CFD).

En este apartado se encontrará una explicación de cada programa, qué problemas podrían resolverse, así como los requisitos necesarios para poderse instalar en un ordenador, y finalmente se comentará cómo funcionan las licencias de ambos programas. En lo que respecta a FEMLAB, ya que finalmente no fue el seleccionado, la mayoría de estos apartados se encontrarán en el Anexo A.

El apartado licencias se consideraba que era un apartado de interés para comentarlo de forma detallada, ya que se adquirieron las licencias de uso de ambos programas por parte del Departamento de Reactores.

3.2.1. Entorno Linux

❑ Instalación de Linux Red Hat.

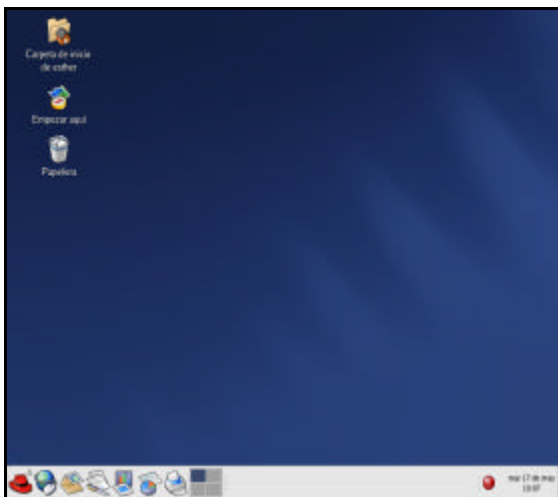


Ilustración 3.5. Red Hat de Linux.

Una vez que ya se tenía la WS de DELL ubicada en el despacho se pasó a la preparación del sistema operativo que venía incorporado con la estación de trabajo. El SO se trataba del Linux Red Hat versión 3. La instalación de los diversos dispositivos adicionales en un sistema operativo Linux fue un poco más compleja que una instalación de Windows, porque se buscaba la fiabilidad y la mayor capacidad operativa que Linux es capaz de ofrecernos.

En principio los pasos a seguir en la instalación de cualquier sistema operativo son: [3]

- i) *Definición del particionamiento del/de los disco(s) duros:* El disco duro ya se encontraba particionado y por lo tanto este paso no fue necesario.
- ii) *Detección de los dispositivos:* Los principales dispositivos ya se encontraban instalados cuando se entregó la WS. Sin embargo, aparatos como las impresoras y los pendrives necesitaron de una instalación.
- iii) *Instalación del sistema base:* El SO Red Hat version3 ya se encontraba totalmente instalado.



iv) *Instalación de la red:* Para poder utilizar la WS en la red del departamento, fue necesaria la configuración de la interfaz conocida como eth0 que está integrada en la placa base. El principal parámetro a configurar fue la IP de la máquina y su máscara de red. Mediante el comando ipconfig podemos ver como quedó configurada la misma.

```
alfred@alfred]$ /sbin/ifconfig
eth0  Link encap:Ethernet HWaddr 00:11:43:17:1B:85
       inet addr:147.83.141.168 Bcast:147.83.141.255 Mask:255.255.255.0
       UP BROADCAST RUNNING MULTICAST MTU:1500 Metric:1
       RX packets:581428 errors:0 dropped:0 overruns:0 frame:0
       TX packets:669137 errors:0 dropped:0 overruns:0 carrier:0
       collisions:0 txqueuelen:1000
       RX bytes:356518014 (340.0 Mb) TX bytes:469791666 (448.0 Mb)
       Base address:0xccc0 Memory:dfce0000-dfd00000

lo    Link encap:Local Loopback
       inet addr:127.0.0.1 Mask:255.0.0.0
       UP LOOPBACK RUNNING MTU:16436 Metric:1
       RX packets:63406 errors:0 dropped:0 overruns:0 frame:0
       TX packets:63406 errors:0 dropped:0 overruns:0 carrier:0
       collisions:0 txqueuelen:0
       RX bytes:4857523 (4.6 Mb) TX bytes:4857523 (4.6 Mb)
```

V) *Definición de la cuenta root y las cuentas de usuarios:* La cuenta root, sin limitación alguna, ya venía instalada con el SO como ya es habitual en los sistemas operativos Linux. Esta cuenta es la que habitualmente utilizará únicamente el administrador del sistema.

Se creó también una cuenta llamada Fluent. Será en esta cuenta donde se instalaría el programa utilizado en nuestro proyecto.

vi) *Configuración de los servicios básicos.* Se configuran los servicios básicos que tiene Linux, que son los habituales de cualquier sistema.

❑ **Instalación de software adicional.**

Una vez configurado el SO (pasos del i al vi), se procedió a la instalación de Software adicional para poder trabajar en la WS normalmente. Para este apartado se escogió el paquete conocido como *Open Office*. Este paquete es a Linux lo que es el famoso paquete Office para Windows. No entraremos en detalles pues no es un Software crítico para el desarrollo, pero si mencionaremos que este paquete es un SW libre y de tipo open-source (código abierto) y que ofrece prácticamente las mismas posibilidades que el Office de Microsoft. Dentro de este paquete se puede encontrar desde el típico editor de texto hasta una hoja de cálculo o bien un programa para realizar una presentación mediante diapositivas. [4]



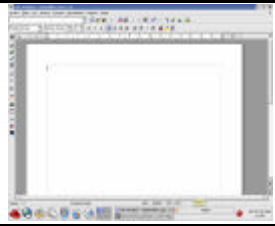
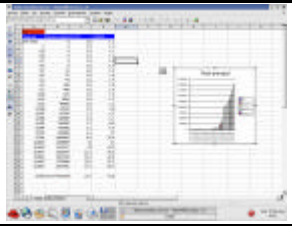
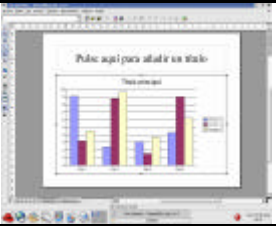
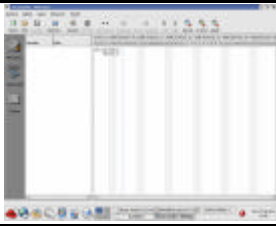
Editor de texto	Hoja de cálculo	Presentaciones	Gestor de Proyectos
			
OpenOffice 1.1.0	Hoja Cálculo	Present.PWP	Mr Project
Tipo de archivo: X.org	Tipo de archivo: X.sxc	Tipo de archivo: X.sxi	Tipo de archivo: X.mrproject

Tabla 3.3. Software adicional de Linux.

Otro SW adicional a instalar fue el navegador de Internet. De entre las diferentes posibilidades se escogió el Navegador conocido como *Mozilla*. Este navegador ofrece las mismas posibilidades que el Explorer de Windows. Su instalación y uso no presentó grandes problemas.




Internet		Paquete matemático
		
Mozilla		Openoffice math
1.- Página de ayuda on-line del SO Red Hat.	2.- Páginas del Departamento de Ingeniería Química de la UPC.	Es un Editor de Ecuaciones.

Tabla 3.4. Más software adicional.

❑ Instalación de Fluent.

La instalación de Fluent que se realizó se hizo de modo que la WS actuase como servidor para ejecutar esta aplicación desde otras estaciones de trabajo en caso de ser necesario, tal y como finalmente se utilizó. [5]

➤ Requisitos.

Las recomendaciones para poder ejecutar FLUENT son las siguientes:

- Un mínimo de 256 MB de memoria RAM.
- Un espacio de 280 a 330 MB libres en el disco duro para la instalación del software a los que habría que añadir 400 MB más en el caso de querer tener disponible la documentación.
- Para poder instalar el software se necesitará o bien conexión por Internet o bien una unidad de CD-ROM.
- Los productos de Fluent Inc. soportan varios dispositivos y drivers de visualización dependiendo del sistema.



En la siguiente tabla podemos comprobar algunas especificaciones dependiendo del proveedor de la máquina en la que se ejecute este Software. Dichas especificaciones nos ayudarán a la hora de escoger la máquina y el SO sobre los que se ejecutará el programa. En rojo se señala la opción escogida para nuestra WS.

Proveedor	Plataforma	Sistema Operativo	32/64 bit
HP	Itanium	HP-UX 11i (11.2x)	64
	PA-RISC	HP-UX 11i (11.1x)	32/64
	PA-RISC	HP-UX 11.0	32/64
	Alpha	Tru64Unix 5.0A, 5.1	64
	Alpha	Tru64Unix 5.1A	64
IBM	Power3	AIX 5.1	32/64
	Power4		32/64
	Power4	AIX 5.2	32/64
	Power4	AIX 5.3	32/64
	Power5		32/64
SGI	Altix-Itanium	ProPack 3	64
	R10K R12K R14K R16K	IRIX 6.5	32/64
SUN	Ultra	Solaris 8	32/64
	Ultra	Solaris 9	32/64
	Ultra	Solaris 10	32/64
Fujitsu	Primepower	Solaris 8	64
	Primepower	Solaris 9	64
Linux	Itanium	Red Hat EL 3.0	64
	Itanium	SUSE SLES 9	64
	Pentium/Xeon	Red Hat EL 3.0	32
	Pentium/Xeon	SUSE 9.0, 9.1; SUSE SLES 9	32
	Pentium/Xeon	SUSE SLES 8	32
	Athlon	Red Hat EL 3.0	32
	Athlon	SUSE 9.0, 9.1; SUSE SLES 9	32
	Athlon	SUSE SLES 8	32
	AMD64/Opteron	Red Hat EL 3.0	64
	AMD64/Opteron	SUSE 9.0, 9.1; SUSE SLES 9	64
	Xeon-64/EM64T	Red Hat EL 3.0	64
	Xeon-64/EM64T	SUSE 9.1; SUSE SLES 9	64
Windows	Pentium/Xeon	XP	32
	Pentium/Xeon	2000	32
	Athlon	XP	32
	Athlon	2000	32

Tabla 3.5. Especificaciones técnicas instalación Fluent según proveedor de la máquina. [6]

3. Preliminares a la simulación



➤ **License Management Software**

FLUENT Inc. utiliza FLEXlm™ License Management para controlar el uso de sus productos. Éste será pues la aplicación encargada de autorizar cuántas copias del software pueden ser utilizadas simultáneamente o restringir el uso del programa en determinadas máquinas.

Distinguiremos entre servidor de licencias y clientes dependiendo de las aplicaciones que se ejecuten en uno u otro ordenador. Igual pasará con FEMLAB tal y como se puede ver en el Anexo A “Componentes Informáticos, Software y Hardware”

En el primer caso se tratará de la máquina encargada de ejecutar el programa de gestión de licencias. Será capaz de gestionar una red heterogénea de ordenadores formada por ordenadores basados en Windows, Linux, Unix y Mac OS.

El segundo caso, es en el que se ejecuta una aplicación. En este caso no necesitará de que se ejecute el software de licencias pero si será indispensable una conexión con el servidor de licencias para poder ejecutar la aplicación.

➤ **Instalación.**

Para la instalación se siguieron los pasos marcados por el manual editado por Fluent Inc. “Installation Guide for Fluent Products”. Los pasos realizados fueron los siguientes: [7]

1. Cambiar a usuario Fluent.
 2. Cambiar a la unidad de CD-ROM `>cd /cdrom`
 3. Instalación del software `>fluent_install`
 4. Configuración:
 - a. Configuración del entorno para el SW Fluent, necesario para poder ejecutar el SW. En el caso de Red Hat 6.0, al encontrarnos en un entorno bin el comando fue: `>set path = (path/Fluent.Inc/ bin: $path)`
 - b. Configuración de FlowLab: Para el buen funcionamiento de FlowLab dentro de un conjunto de ordenadores conectados en red, como es en este caso. Se recomienda la creación de un fichero FLOWLAB.ini para cada usuario. Este fichero contendrá tres variables que apuntarán a la localización de las plantillas (templates) incluidas en el SW y el directorio de trabajo del usuario. Las tres variables serán:
 - i. `FLOWLAB_TEMPLATE_DIR <InstallArea>/flowlabv.v/templates`
 - ii. `FLOWLAB_WORK_DIR <HOME>/<TemporaryWorkArea>`
 - iii. `FLOWLAB_SAVE_DIR <HOME>/<SaveWorkArea>`
- v.v → es la versión del SW.



<HOME> → Directorio de trabajo del usuario.

<InstallArea> → es el path o camino hasta la ubicación de Flowlab.

<TemporaryWorkArea> → será la dirección en la que FlowLab creará los archivos mientras se está ejecutando.

<SaveWorkArea> → será el directorio de almacenamiento.

Cada una de las tres variables deberá estar ubicada en una línea en el archivo FLOWLAB.ini

➤ **Licencias.**

Todos los productos de FLUENT Inc. están controlados por licencias. Se necesitará pues o un archivo de licencia o bien un servidor de licencias accesible antes de poder ejecutar el software.

Como ya se ha comentado la ejecución de Fluent está supeditada a la instalación de la licencia apropiada proporcionada por la compañía de software. Para realizar la instalación se siguieron los siguientes pasos:

1. Cambiar a usuario Fluent.
2. Cambiar a la unidad de CD-ROM >cd /cdrom
3. Instalación del software: >fluent_install
4. Ubicarnos en **Home/Fluent/Fluent.Ini/bin/lmhostid**
5. Modificar el fichero license.dat con el path absoluto a FluentLm
 - a. Path → /home/fuent
 - b. Archivo → Al ser un SO Red Hat sobre un procesador AMD el archivo será lnx86

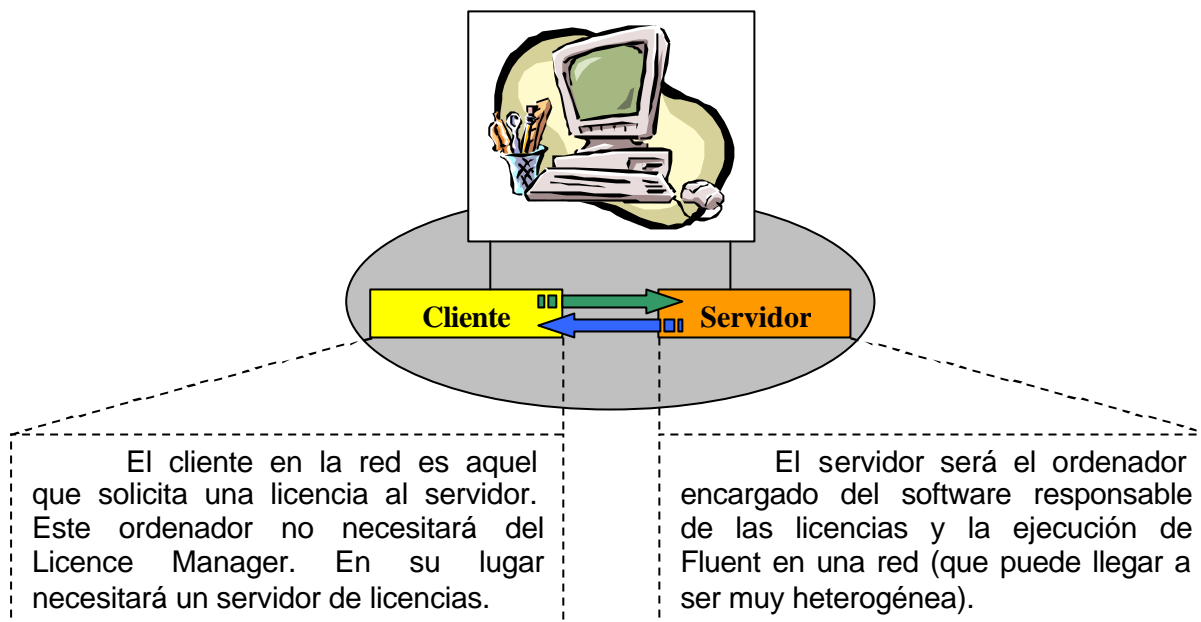
➤ **Ejecución de Fluent.**

La opción por la que se optó a la hora de ejecutar Fluent fue la de ejecutar sobre el mismo ordenador, la WS, el programa cliente y el programa servidor. Pero antes de esto se realizó un cambio en los permisos de ejecución y lectura del programa para permitir a otros usuarios el poder utilizar esta aplicación.

Para realizar este cambio se utilizó el comando **chmod** para darles permiso de lectura y ejecución sobre el programa al grupo Fluent.

Cabe destacar que por medio de otras aplicaciones de conexión como **WinX32** es posible conectarse al ordenador abriendo una consola que simulará el escritorio de linux en un entorno de windows, pudiendo así trabajar como si se estuviera delante de la WS.





3.2.2. Femlab

FEMLAB es un software que utiliza el método de análisis por elementos finitos para el modelado y simulación de problemas científicos y de ingeniería basados en ecuaciones diferenciales de derivadas parciales (PDEs). [8]



Ilustración 3.6. Logotipo Femlab. [8]

Cualquier modelo físico que se describa mediante PDEs puede ser modelado virtualmente por este programa. Se incluyen acústica, difusión, electromagnetismo, transferencia de calor, flujo de fluidos, estructuras mecánicas...etc. También se pueden comparar las interacciones que se producen entre diversos estados, ya que FEMLAB es interdisciplinario. Se desarrollan procesos más eficaces y se acorta el tiempo de comercialización del producto, mediante opciones de diseño más rápidas que aparecen al eliminar o reducir los prototipos físicos

Dentro del FEMLAB 3.1 hay un módulo específico de Ingeniería Química, que hubiese sido la opción escogida en caso de haberse seleccionado finalmente FEMLAB, ya que este módulo es una herramienta para modelar procesos y equipos específicos de la ingeniería química. Este módulo está orientado a fenómenos de transporte, reacciones químicas y operaciones en unidades. [9]

Los apartados donde se comentan los requisitos para su instalación en Windows o UNIX/Linux, la arquitectura Cliente-Servidor y cómo funcionan las licencias se podrán ver de forma detallada en el Anexo A.



3.2.3. Fluent-Gambit

Fluent es uno de los programas más importantes del software de la dinámica de fluidos computacional (CFD). Este software se utiliza para la simulación, la visualización, y el análisis del flujo fluido, del calor y de la transferencia total, y de reacciones químicas. [10] [11]



Ilustración 3.7. Logotipo Fluent. [6]

Este software también utiliza el método de análisis por elementos finitos para el modelado y simulación de problemas científicos y de ingeniería basados en ecuaciones diferenciales de derivadas parciales (PDEs).

Es una parte vital del proceso de la ingeniería automatizada (CAE) para las compañías alrededor del mundo, y se despliega en casi cada industria fabril. Este software es ampliamente utilizado en industrias que abarcan gran cantidad de campos diversos. Todos ellos se podrán ver más detallados en el Capítulo 4.1.1. [12]

▪ Gambit

Es un pre-procesador integrado para los análisis CFD. El usuario utiliza Gambit, bien para construir la geometría y generar una malla para ella, bien, para importar una geometría creada por paquete de dibujo 3D CAD/CAE, realizarle las modificaciones adecuadas, y generarle una malla. [13]

Las opciones de mallado que facilita Gambit ofrecen flexibilidad y posibilidades. Se pueden seleccionar geometrías para estructuras de mallado, o la opción automática no estructural de mallado hexaédrico. También se pueden generar mallas de gran calidad con elementos triangulares y cuadráticos, así como mallados que contengan elementos con forma de pirámides y prismas.

GAMBIT también proporciona herramientas para la revisión de la calidad de la malla. Esto ayuda a asegurar que la malla es apropiada para poder obtener una solución en el caso en el que se le requiera. [14]



4. Simulación de una combustión de Gas Natural

En el capítulo 4, se explicará el desarrollo de la simulación que se realizará en este proyecto, la combustión de un quemador de Gas Natural, desde su planteamiento hasta la obtención de sus resultados.

Primeramente, será necesario una fase de adaptación al entorno en el que se va a trabajar, ya que antes de iniciar la simulación es necesario coger manejo en la utilización de los simuladores que se utilizarán.

Los capítulos 4.2 y 4.3 son el núcleo central de este proyecto. En el primero se realiza la simulación de la combustión del quemador de gas natural, dando una serie de pasos a tener en cuenta para poder realizar cualquier simulación. Para este punto únicamente fue necesario el paquete básico de Fluent. En cambio, en el punto 4.3 se estudiará la formación de NO_x en la combustión. Ya que uno de los objetivos era minimizar la cantidad de este contaminante, en ese capítulo lo que se estudia son una serie de parámetros relacionados con la formación de NO_x y ver cómo responde el sistema ante ellos. Para este estudio, fue necesario parte del paquete adicional Medioambiental de Fluent, con lo que fue necesaria una licencia adicional.

En este caso también se haya una breve descripción de la fase de aclimatación a este paquete de simulación.

4.1. Adaptación al entorno

En este capítulo se comentará la base de cálculo en la que se basa el simulador escogido, Fluent. Se trata de la dinámica de fluidos computacional: CFD. También se comentará la evolución que ha sufrido este aspecto desde la aparición de las modernas herramientas informáticas que hay en la actualidad, con una mayor capacidad de procesamiento.

Posteriormente, se ampliará la información del Software utilizado, Fluent, destacando los campos de la industria en los que es utilizado actualmente, así como se hará especial hincapié en el módulo de Medio Ambiente que posee Fluent, ya que una opción de éste es el que será utilizado para realizar parte de este proyecto, el capítulo que estudia las emisiones del contaminante NO_x en el quemador.

Finalmente, en un tercer apartado de este capítulo se comenzará a tener contacto con una de las herramientas que será importante manejar correctamente: Gambit. Se dibujaron una serie de figuras para conseguir dos objetivos, primeramente conseguir manejo en el dibujo de las geometrías y mallado de éstas, y por otro lado se pretendía comprobar la capacidad de cálculo que tenía la estación de trabajo adquirida, es decir se trató de concretar las posibilidades que Fluent podía ofrecer ejecutándose en la WS.



4.1.1. Dinámica de fluidos computacional (CFD)

La dinámica de fluidos computacional (CFD) es una herramienta poderosa para la simulación numérica de flujo de fluidos. CFD es uno de los campos que se ha desarrollado más fuertemente desde el reciente desarrollo de ordenadores de mayor capacidad de procesamiento, es decir, más rápidos, y de la aparición de nuevos códigos CFD, ya que permiten simulaciones que antes ni se consideraban. [15]

El desarrollo de procesos y productos se intenta desarrollar simultáneamente, para ello se necesita capacidad de análisis y formulación de prototipos rápida, y esta es la solución que CFD ofrece a una problemática que se ha producido en los últimos años, ya que ha existido un gran interés en mejorar la eficiencia global de los procesos de producción y minimizar residuos, la exigencia de conseguir soluciones correctas para el medio ambiente, el aumento de las expectativas de los clientes y la búsqueda de mayores beneficios económicos por parte de las empresas productoras, ya que les resulta mucho más rentable realizar una simulación a su objeto de estudio que realizar una aproximación tradicional llevando un producto del laboratorio a planta piloto y luego a escala de producción, debido a los costes que esto implica.

CFD es una tecnología de la que se espera poder obtener ciclos de desarrollo producto-proceso más corto, optimizar procesos existentes, optimizar requerimientos energéticos, y hacer diseños eficientes. CFD puede ser integrado en el ciclo producto-proceso en varios estados, como muestra la Ilustración 4.1.

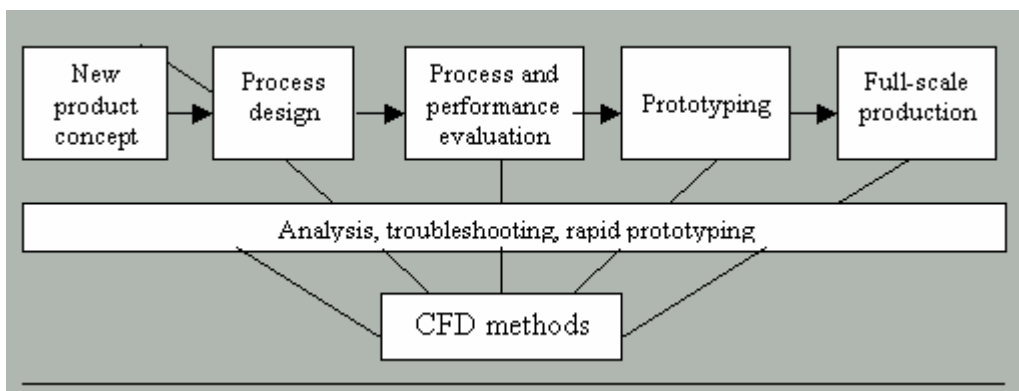


Ilustración 4.1. Integración de CFD producto-proceso [15]

Teoría: CFD es un método que se está convirtiendo en más y más popular para simular sistemas de fluidos en muchos campos, incluyendo reacciones. Hace que sea posible solucionar numéricamente flujos y balances de energía en complicadas geometrías. Obtiene resultados que son difíciles de obtener con otros métodos de modelado convencional. [16]

CFD aprovecha ecuaciones de Navier Stokes y balances de energía sobre volúmenes de control, pequeños volúmenes dentro de la geometría en una localización definida representando las reacciones internas.

❑ ***Historia de Dinámica de Fluidos Computacional:***

El campo relativamente joven de CFD está en rápido crecimiento debido al incremento de capacidades de los ordenadores y un creciente campo de aplicaciones. Es una herramienta de investigación en mecánica e ingeniería civil donde es usado para cálculo de esfuerzo en estructuras sólidas. Ha sido utilizado para ejemplos de la industria del automóvil y aviación para costosas pruebas de nuevos diseños. Más recientemente, CFD ha sido introducido en el campo de la Ingeniería Química con la introducción a programas de mezclas de fluidos específicos y la opción de solucionar reacciones químicas.

Comercialmente los códigos disponibles que CFD usa es uno de los tres métodos de discretización espacial básica, diferencias finitas (DF), volúmenes finitos (VF) o elementos finitos (EF). Los primeros códigos escritos usaban métodos DF o VF y han sido usados para una gran variedad de problemas de flujo. La mayor desventaja del método DF es que está limitada a estructuras que tienen dificultad en la aplicación a geometrías complejas. [17]

❑ ***Método de elementos finitos:***

La solución del sistema se basa en balances de masa, momento y conservación de energía expresadas como ecuaciones en derivadas parciales (PDEs).

CFD implica la resolución de estas ecuaciones, mediante el método de elementos finitos. Subdivide un objeto en pequeños elementos, que determinan las localizaciones dentro del dominio donde se aplican las ecuaciones usando técnicas de discretización. Este proceso se denomina mallado del sistema.

A cada elemento se le asignan unas ecuaciones características, (que describen las propiedades físicas, las condiciones de contorno y las fuerzas impuestas), las cuales se resuelven simultáneamente. [18]

A diferencia de los métodos experimentales CFD proporciona datos de presión velocidad, densidad, temperatura y otras cualidades de interés en todos los puntos del dominio de flujo simulado.

Programas:

Hay varios programas que compiten en prestaciones, algunos de ellos son ANSYS, FLUENT y FEMLAB. Estos dos últimos ya han sido ampliamente comentados.

De todas formas, se ha creído necesario ampliar la información dada sobre Fluent, que es el base en la que se fomenta este proyecto.



4.1.2. Fluent

A continuación se mostrará los ámbitos de aplicación que tiene este programa en la actualidad. Para este proyecto se escoge el modulo de aplicaciones ambientales.

Industrias que utilizan FLUENT
Aeroespacial
Aplicaciones
Industria del Automóvil
Aplicaciones Biomédicas y de la salud
Procesos Químicos
Electrónica
Ambiental
Industria de la Alimentación y la bebida
Células de Combustible
Cristal
Procesos de Mezclado
Energía Nuclear
Aceite & Gas
Proceso de Polimerización
Generación de Energía
Bombas
Semiconductores
Campo de Deportes y equitaciones atléticas
Acero

Tabla 4.1. Tipo de Industrias que utilizan Fluent. [6]

Módulo Aplicaciones Medioambientales:

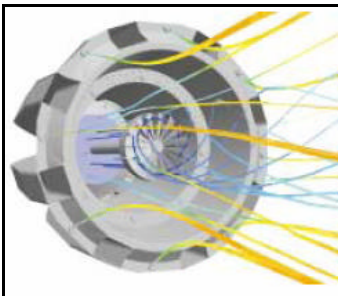
La protección y el cuidado de la calidad del medio ambiente requiere hoy en día de la innovación de diseño de soluciones que cada vez establecen y han de competir con regulaciones más estrictas. La simulación con el software de CFD en Fluent permite tratar problemas de flujo medioambientales encaminándose hacia una mayor eficiencia y un menor coste posible. Se basan en modelos físicos y otras técnicas experimentales para aprovisionar en detalle a los problemas de flujo de fluidos, incluyendo procesos físicos complejos como turbulencia, reacciones químicas, transferencia de calor y masa, y flujos multifases. En muchos casos, se pueden construir y analizar modelos virtuales en una fracción de tiempo y coste del modelo físico real. Esto permite investigar más opciones de diseño y estudiar más casos. También permite estudiar casos que serían demasiado costosos o simplemente prohibitivos de analizar únicamente con técnicas experimentales. [19]

El paquete Fluent proporciona estas ventajas y permite a muchas empresas ser competitivas hoy en día. El Software CFD combina la creación de la geometría y generación de la malla con los modelos de ingeniería más adecuados con un robusto, real y manejable paquete.

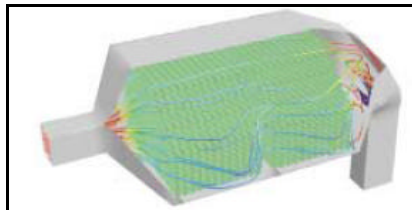


Fluent se puede utilizar en aplicaciones del Medio Ambiente del estilo de:

❑ **Control de la Polución:**



Quemador de Bajo NOx: permite estudiar la efectividad de los conceptos de bajo NOx, y entender el impacto FGR en la mezcla fuel/aire, la llama y la temperatura pico.

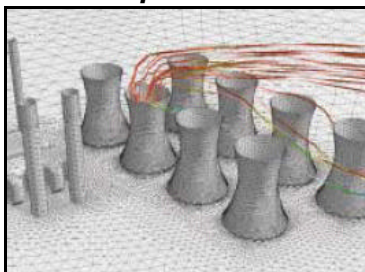


Precipitado Electrostático: se analiza la efectividad de usar vanas para crear una distribución de flujo más uniforme y la eficiencia ESP.

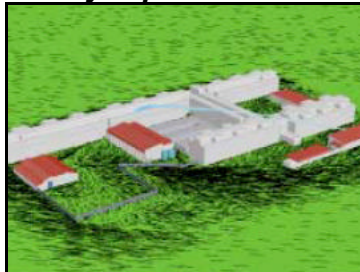


Scrubber Sox: para identificar una mala distribución de un gas.

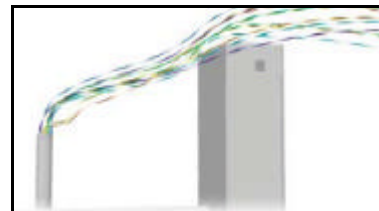
❑ **Dispersión de la Polución y exposición al hombre:**



Dispersión Polución desde una Torre: se predice las estructuras de contaminación atmosférica.



Dispersión desde Laboratorio Químico: se investiga el transporte y la dispersión casos Hazard.

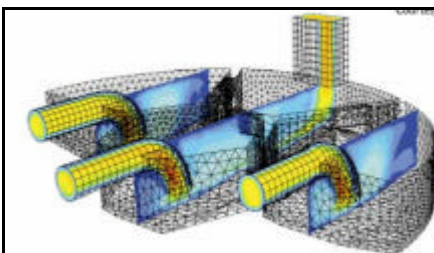


Exhausta trayectoria Polución: se ilustra la vulnerabilidad de la ventilación de un edificio.

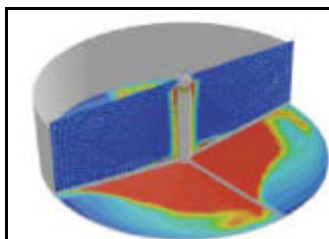
❑ **Otras aplicaciones a la calidad del aire:**

Otros casos que se estudian son: investigaciones de escenarios de accidentes, ciclones, desulfuración de gases, quemadores de NOx, dispersión de polución (industriales y urbanas), estudios de vientos....

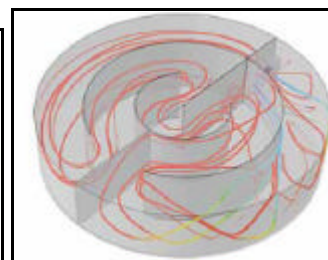
❑ **Tratamiento de Aguas:**



Flujo a través de una estación de aguas residuales.



Tanque Repartimiento circular.



Tanque contacto de cloro.

❑ **Otras aplicaciones a la calidad del agua:**

Otros casos que se estudian: clarificadores, tanques de contacto, filtros, disposición de efluentes, distribución de flujo en canales o tuberías, mezcladores, tuberías, sedimentadores, válvulas, desinfección UV...

CFD beneficia en estos casos ya que te permite:

- Diseño: optimizar el diseño de equipos de proceso minimizando prototipos y reduciendo tiempo de diseño y gastos. Realizar estudios rápidos y fiables.
- Experimentar con diferentes diseños y parámetros: cambiar diseños y validar el sistema antes de su instalación.
- Resolver Problemas: entender y diagnosticar problemas de forma más rápida y con menos riesgo.
- Salvaguardar y Regular: cuantificar un accidente o escenarios reales y realizar un diseño para encontrar regulaciones medioambientales.
- Escalar: reducir costes de equipos por eliminación de métodos de diseño empíricos. Reducir el coste a través de minimizar el trabajo experimental.
- Entendimiento: incrementar el conocimiento de problemas de flujo y fenómenos de transporte que involucran equipos, sistemas y medio ambiente.
- Visualizar resultados mediante una potente herramienta de pos-procesado.

4.1.3. Estudio del mallado mediante Gambit (2D vs 3D)

Antes de empezar a trabajar en el estudio de la malla, se trató de concretar las posibilidades que Fluent podía ofrecer ejecutándose en la WS de DELL. Para ello se realizaron diversas pruebas con esquemas sencillos para tratar de encontrar empíricamente la limitaciones de nuestro sistema, hasta donde podía ejecutarse el cálculo en la WS, a la vez que se empezaba a tratar con el programa Gambit, permitiendo coger práctica con él. [20]

Para realizar el estudio en 2D se dibujó una simple área cuadrada. En cambio el estudio de los cálculos de mallado con volúmenes fue algo más compleja. Para realizar el estudio en 3D se realizaron dos tipos de pruebas diferentes:

- 1) Un cilindro de 3m altura, $radio1=1\text{ m}$ y $radio2=1\text{ m}$, con la opción que nos facilita Gambit de añadir cilindro dentro de las formas predefinidas. Con ello, veremos que nuestro control a la hora de realizar el mallado sobre la figura es menor que si dibujamos nosotros mismos el cilindro.
- 2) En este caso, dibujamos el cilindro punto a punto. Las dimensiones son 10 m de altura y 1m de $radio1$ y $radio2$. En este caso podemos mallar por separado las bases y los laterales del cilindro, imponiendo escalas de mallado diferentes.

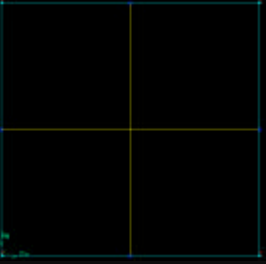
A continuación podremos observar los diferentes datos obtenidos en las diferentes pruebas que se realizaron. En cada una de las pruebas se midió la CPU y la memoria consumida por la WS para poder realizar los cálculos. También podremos ver la evolución del número de mallas en cada uno de los casos estudiados.

Finalmente se realizará una comparativa de los tres casos. Podremos ver el margen de maniobra que la WS y el programa nos permiten a la hora de trabajar y realizar un estudio.



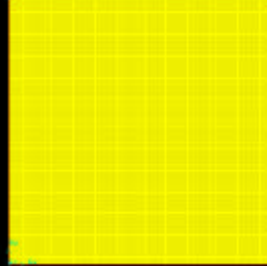
Estudio en 2D.

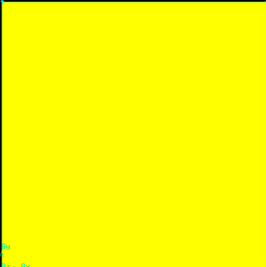
En el caso del estudio en 2D se realizó sobre una superficie cuadrada en la que poco a poco se le fue disminuyendo la escala de la malla hasta llegar al límite en este apartado. Dicho límite se encontró al llegar a efectuar el mallado a una escala de 0,0010. A continuación podremos ver los resultados de alguna de las pruebas:

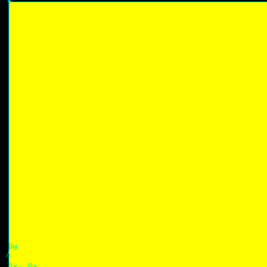
Esquema	Características	
	Escala de la malla	1
	Nº de mallas	4
	Uso de CPU	0,7
	Uso de Memoria	4,8


Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,3
	Nº de mallas	49
	Uso de CPU	0,5
	Uso de Memoria	4,8

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,008
	Nº de mallas	62500
	Uso de CPU	1
	Uso de Memoria	5

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,004
	Nº de mallas	250000
	Uso de CPU	3,7
	Uso de Memoria	8

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,0019
	Nº de mallas	1108809
	Uso de CPU	13,6
	Uso de Memoria	28,8

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,0015
	Nº de mallas	1776889
	Uso de CPU	17,9
	Uso de Memoria	61,1

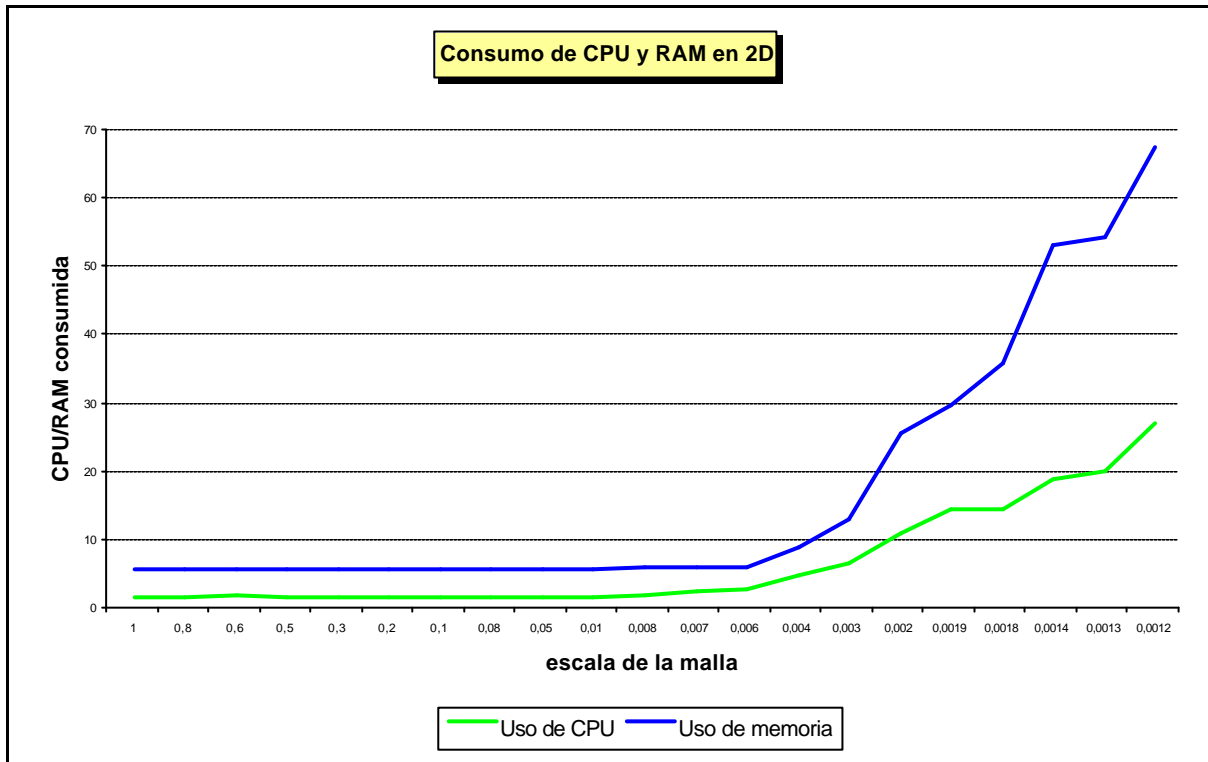
Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,0010
	Nº de mallas	-
	Uso de CPU	-
	Uso de Memoria	-

Out of Memory!!



Destacar que este ejemplo en 2D ha servido como primer contacto en el aprendizaje en dibujar y mallar una figura con GAMBIT, ya que como se verá en el capítulo 4.2.4 las geometrías realizadas en este proyecto serán en 2D.

Como podemos ver en el gráfico, el consumo de CPU y de RAM tiene una evolución exponencial a medida que la exigencia provocada por la escala de la malla aumenta.



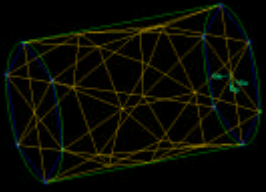
Gráfica 4.1. Consumo de CPU y RAM en el estudio 2D.

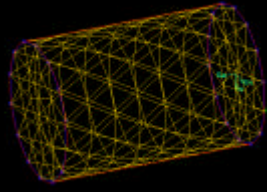
Analizando los datos podemos ver que en el umbral del orden de 10^{-4} (0,0010) el procesador y la memoria disponible no son suficiente para poder realizar todos los cálculos necesarios en el mallado de la figura.

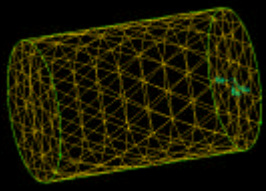
El número más alto de mallas conseguido en estas pruebas fue **2778889** con una escala de 0,0012.

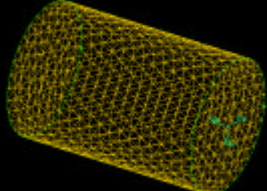
Estudio en 3D

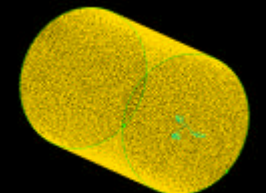
Para empezar a analizar el comportamiento de Fluent en 3D se optó por probar la WS mallando un cilindro. Dicho cilindro se encontraba dentro de las figuras predeterminadas que el programa proporciona. Al igual que en el caso de 2D se fue aumentando la precisión del mallado reduciendo la escala de la malla. En este caso el programa no resistió una escala de 0,02.

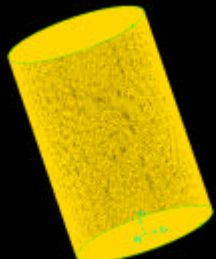
Esquema	Características	
	Escala de la malla	1
	Nº de mallas	61
	Uso de CPU	3,8
	Uso de Memoria	10,1


Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,6
	Nº de mallas	340
	Uso de CPU	3,3
	Uso de Memoria	10,1

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,4
	Nº de mallas	1263
	Uso de CPU	2,9
	Uso de Memoria	10,1

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,2
	Nº de mallas	9443
	Uso de CPU	2,7
	Uso de Memoria	10,1

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,05
	Nº de mallas	530538
	Uso de CPU	1,2
	Uso de Memoria	10,1

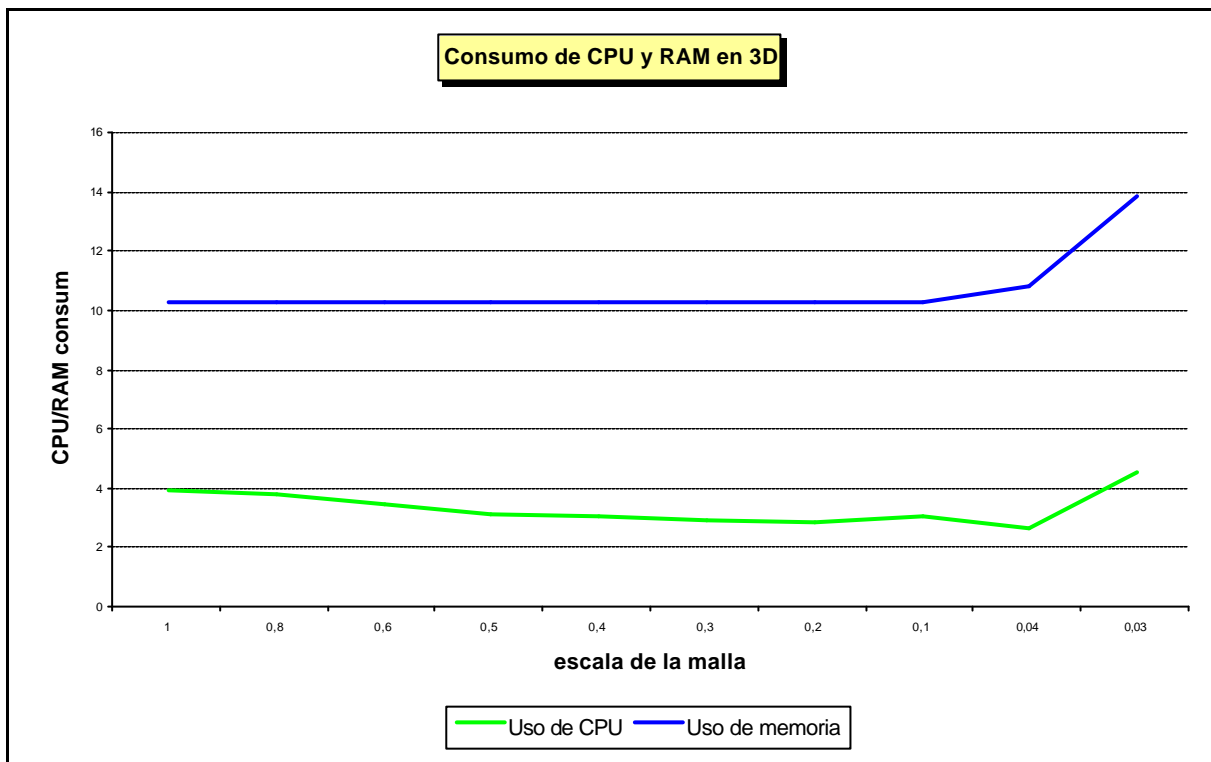
Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,03
	Nº de mallas	2523377
	Uso de CPU	4,4
	Uso de Memoria	13,7

Esquema	Características	
	Escala de la malla	0,02
	Nº de mallas	-
	Uso de CPU	-
	Uso de Memoria	-

Out of Memory!!



En este caso podemos ver que ni el consumo de la CPU ni el consumo de la memoria RAM es excesivo. Aún así, el número de mallas producidas con cada reducción de la escala si que produce al final un fallo en la operación del mallado.



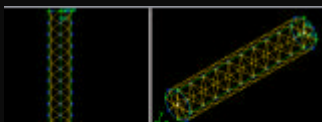
Gráfica 4.2. Consumo de CPU y RAM en el estudio 3D figura predeterminada.

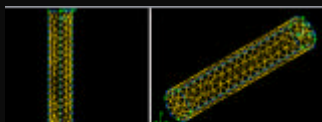
En el gráfico se puede observar como en este caso lo que se produce es una evolución prácticamente invariable (sobretudo Uso de memoria, en azul), hasta el punto en el que se produce un rápido crecimiento que dará lugar rápidamente al fallo del sistema.


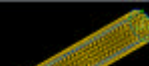
En este caso el número más alto de mallas conseguidas fue 2523377 con una escala de 0,03. Podemos comprobar como el número de mallas conseguidas antes de fallar es similar, pero esta vez el fallo se produce con una escala de 10^{-2} , exactamente con una escala de 0,02.



Estudio 3D con figuras no predeterminadas

En Gambit, se permiten definir volúmenes. Esta fue la última prueba antes de empezar con las pruebas analíticas de un quemador de combustión. Definimos un cilindro a partir de dos bases circulares y las correspondientes caras laterales. En este caso había dos escalas a probar pues, la de las bases y la de los lados. En este caso el límite llegó con una escala en la base de 0,02 y de 0,01 en el lado.

Esquema		Características		
	Escala de la malla	Base	1	
		Lados	1	
	Nº de mallas		355	
	Uso de CPU		5,4	
Uso de Memoria		6,9		


Esquema		Características		
	Escala de la malla	Base	0,6	
		Lados	0,6	
	Nº de mallas		1386	
	Uso de CPU		3,6	
Uso de Memoria		6,9		

Esquema		Características		
		Escala de la malla	Base	0,2
			Lados	0,2
		Nº de mallas	28481	
		Uso de CPU	4,8	
		Uso de Memoria	6,9	

Esquema		Características		
		Escala de la malla	Base	0,07
			Lados	0,06
		Nº de mallas	595856	
		Uso de CPU	16,5	
		Uso de Memoria	6,9	

Esquema		Características		
		Escala de la malla	Base	0,05
			Lados	0,05
		Nº de mallas	1517386	
		Uso de CPU	25,5	
		Uso de Memoria	9,2	

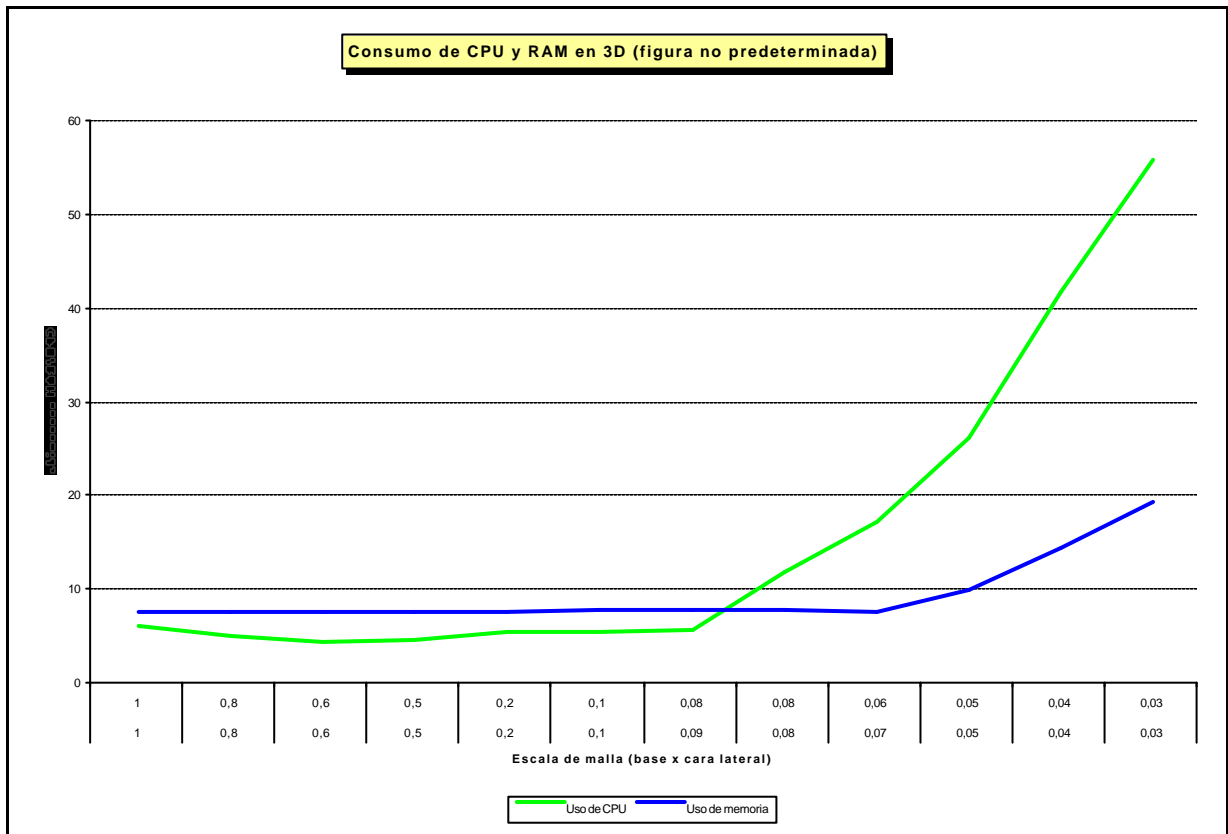
Esquema		Características		
		Escala de la malla	Base	0,03
			Lados	0,03
		Nº de mallas	6069857	
		Uso de CPU	55	
		Uso de Memoria	18,5	

Esquema	Características		
	Escala de la malla	Base	0,02
		Lados	0,01
	Nº de mallas		-
	Uso de CPU		-
	Uso de Memoria		-

Out of Memory!!



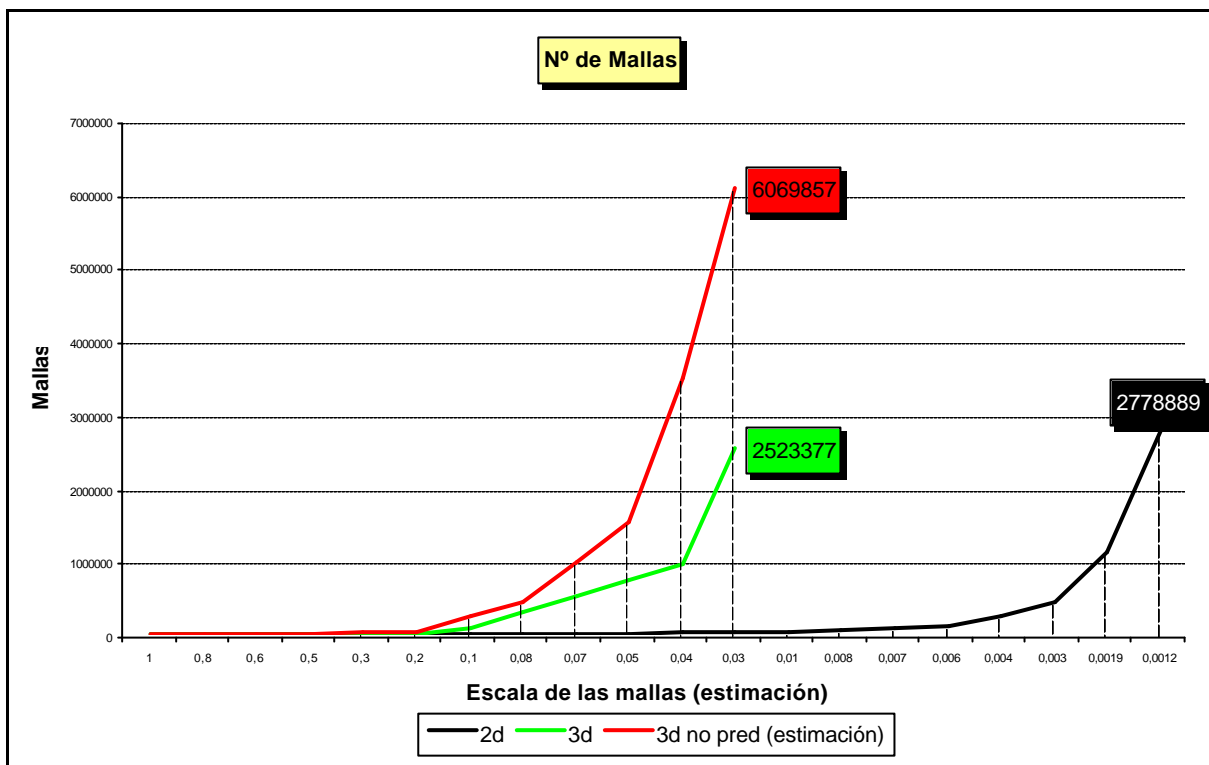
Si estudiamos el tercer caso, una figura dibujada en 3D no predeterminada se observa que en este caso se produce un hecho excepcional. Por primera vez en todas las pruebas podemos ver un esfuerzo superior en el procesador que en el consumo de memoria. Esto es así por la gran cantidad de cálculos que la CPU debe hacer para mallar las diferentes superficies.



Gráfica 4.3. Consumo de CPU y RAM en el estudio 3D.

En este caso el número de mallas conseguidas con cada prueba es claramente superior a cualquiera de los otros dos casos. Pese a estar en un orden de escala idéntico al de la misma prueba de 3D el número de mallas conseguido fue de **8078324** con una escala de 0,03 en la base y 0,02 en los lados.

Conclusiones



Gráfica 4.4. Comparación número mallas obtenido en cada caso estudiado.

Como podemos ver en la gráfica vemos que aunque los casos de 3D fallan aproximadamente con los mismos parámetros, el número de mallas conseguido por uno y otro con los mismos valores es muy diferente. Las mallas (y por lo tanto los cálculos) son más numerosas en el caso de las figuras 3D no predeterminadas.

También podemos observar la gran reducción que debemos forzar en el caso de 2D para conseguir encontrar el límite. Y aún con una escala de 10^{-3} el número de mallas es muy similar al conseguido en el caso de la figura 3D con un orden de escala de 10^{-2} .

Cabe resaltar que en todos los casos, el fallo se produce porque la memoria es sobrepasada por la cantidad de los cálculos y por el rango de los números producidos en las mismas.

4.2. Realización de la simulación

Las soluciones en CFD, en este caso realizadas con el programa Fluent, se obtienen de solucionar balances alrededor de un gran número de volúmenes de control o elementos. La solución numérica se obtiene por la aplicación de las condiciones de contorno a un modelo de condiciones y la iteración a partir de una solución inicial.

Los balances, fundamentados en el flujo de fluidos, están basadas en las ecuaciones de Navier Stokes para la conservación de masa (continuidad) y momento. Estas ecuaciones se modifican para el caso de solucionar un problema específico.

El control de volúmenes o elementos, se realiza mediante una geometría, o malla del problema, realizado con un programa llamado GAMBIT, similar al dibujar por ordenador en CAD. La densidad y precisión de estos elementos en la geometría son determinados por el usuario y afecta a la solución final. Una malla muy poco densa quizá dará como resultado un flujo simplificado y posiblemente no muestre las características esenciales del caso. Al contrario, una malla demasiado densa produce que se incremente innecesariamente el tiempo de cálculo de iteración.

Después de imponer las condiciones de contorno en la malla realizada en GAMBIT, se itera la malla usando los balances y las condiciones de contorno para encontrar cuando converge la solución numérica para el caso específico a estudiar.

Pasos para la realización de la simulación del quemador en Fluent:

Primero se realizarán una serie de pasos previos que determinarán el problema, el modelo que se utilizará y las condiciones que rodean el problema. Posteriormente, se iniciará la simulación y ésta será dividida en diversos pasos, unos preparatorios para su realización y los últimos, de extracción de resultados y estudio de éstos: [21]

- 1. Descripción del problema.**
- 2. Requisitos previos.**
- 3. Modelo, ecuación utilizados.**
- 4. Realización de la malla.**
- 5. Fundamentos del flujo de fluidos. Ecuaciones**
- 6. Elección del Modelo.**
- 7. Materiales.**
- 8. Condiciones de Contorno.**
- 9. Metodología para obtener resultados.**
- 10. Resultados.**
- 11. Predicción de la formación de NOx.**



❑ Pasos Previos para la simulación:

Los pasos previos corresponden a los tres primeros puntos, ya que como se muestra son puramente teóricos, de concepto, o bien sirven para obtener habilidad en el manejo de los programas.

Introducción: En este proyecto estudiaremos la mezcla de especies químicas y la combustión de un combustible, en este caso gas natural. Para ello se simulará un inyector cilíndrico de metano en medio de un quemador con aire. Ello se realizará usando el Modelo Químico de velocidades finitas o modelo cinético que nos proporciona Fluent, como una de las opciones a escoger. [22]

4.2.1. Descripción del problema

Se considera un quemador cilíndrico. La llama considerada es una llama de difusión turbulenta. Se dispone también de un pequeño inyector en el centro del quemador que introduce metano a 80 m/s. El aire del ambiente entra coaxialmente a 0,5 m/s. el cociente de equivalencia total es de aproximadamente 0,76 (alrededor de un 28% exceso de aire).

La alta velocidad con la que es introducido el metano inicialmente, hace que éste se expanda con muy poca interferencia, entre y se mezcle con el aire a baja velocidad. El número de Reynolds basado en el diámetro de metano es de aproximadamente $5,7 \times 10^3$.

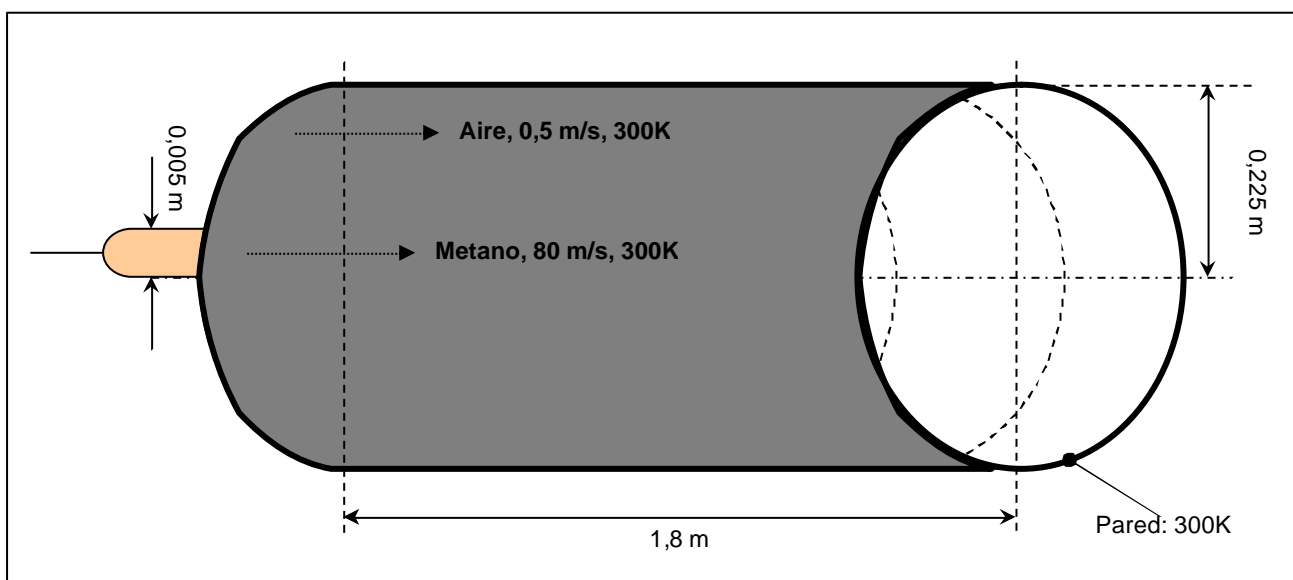


Ilustración 4.2.Descripción gráfica del problema.

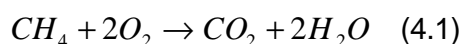
4.2.2. Requisitos previos a iniciar la simulación

Para empezar con la simulación de este problema hubo que familiarizarse con los programas a utilizar, Fluent y Gambit (para realización del mallado tal y como se mostrará en el apartado 4.2.5), realizando ejemplos de éstos que se podían encontrar en las guías de uso de ambos programas, siguiendo las indicaciones que se mostraban. Todo ello era necesario para ver el funcionamiento que estos programas presentaban y los requerimientos que eran necesarios para empezar con la simulación del modelo de combustión, ya que es necesario disponer de una cierta soltura en el manejo de éstos para la resolución de los casos.

Tal y como se ha visto para en el apartado 4.1.2, ya nos empezamos a familiarizar con Gambit en la realización del estudio de las capacidades de cálculo de la WS comparando un modelo 2D con uno 3D, que a la vez nos sirvió como aprendizaje de las herramientas del programa.

4.2.3. El modelo y la ecuación utilizados

Para analizar el sistema de combustión aire-metano se utilizará el modelo químico de velocidades finitas o modelo cinético. La combustión puede ser modelada usando un mecanismo de reacción en un solo paso, asumiendo la conversión completa de combustible a CO_2 y H_2O . La reacción es: [23]



Esta reacción se definirá con los términos de los coeficientes estequiométricos, entalpías de formación y los parámetros que controlan la reacción. La reacción se determinará asumiendo que el proceso de mezclado turbulento es el factor limitante del proceso, y que existe interacción del modelo químico-turbulento. Para ello se utiliza el modelo eddy-dissipation.

Los modelos y ecuaciones utilizados y la explicación de lo que conlleva cada uno y de su elección, se explicarán en los apartados que siguen a continuación, ya formando parte de la simulación.



4.2.4. Realización de la malla

❑ Generar y refinar los elementos finitos del mallado

Las ecuaciones que determinan el sistema se resuelven en localizaciones discretas del dominio de flujo (método de elementos finitos), estas localizaciones se establecen en función del mallado. La exactitud de los cálculos y el tiempo de resolución requerido dependen de la solución del mallado. La experiencia y la habilidad del operario (proyectista, en este caso) juegan un papel fundamental en la elección de un mallado óptimo. [20]

La generación del mallado por elementos finitos debe seguir algunas pautas:

- Representar la geometría del dominio computacional y las condiciones de flujo correctamente.
- Los gradientes de la solución tienen que estar adecuadamente representados.
- No debe contener elementos con ángulos de distorsión elevados.

❑ Tipos de elementos del mallado

El mallado puede contener uno o más ordenes de elementos. La elección del tipo de elemento y el mallado son problemas dependientes. Los elementos empleados en problemas bidimensionales pueden tener forma triangular o de cuadrilátero, puesto que las geometrías más complejas complican enormemente la malla y no aportan mayor precisión. Los elementos que pueden ser usados para los tridimensionales son los tetraedros, hexaedros, prismas o pirámides.

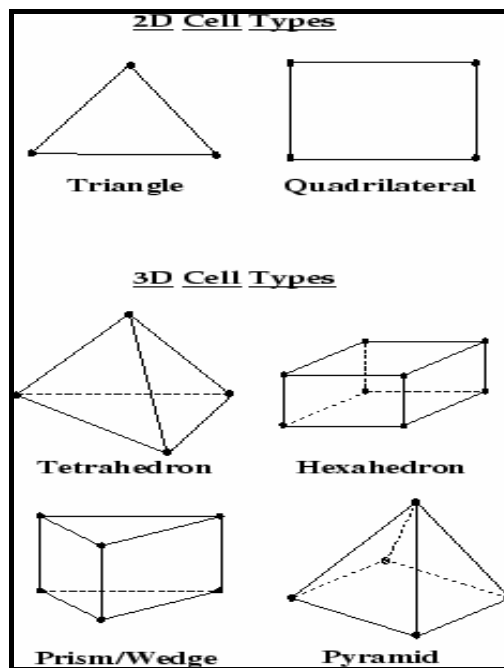


Ilustración 4.3. Elementos de mallado en Gambit. [22]

Como se trata de un modelo 2D a continuación se indicarán las características de las caras y los nodos de los elementos empleados en problemas bidimensionales: triangulares o cuadriláteros. El mallado que es utilizado se adapta automáticamente encajando con la geometría.

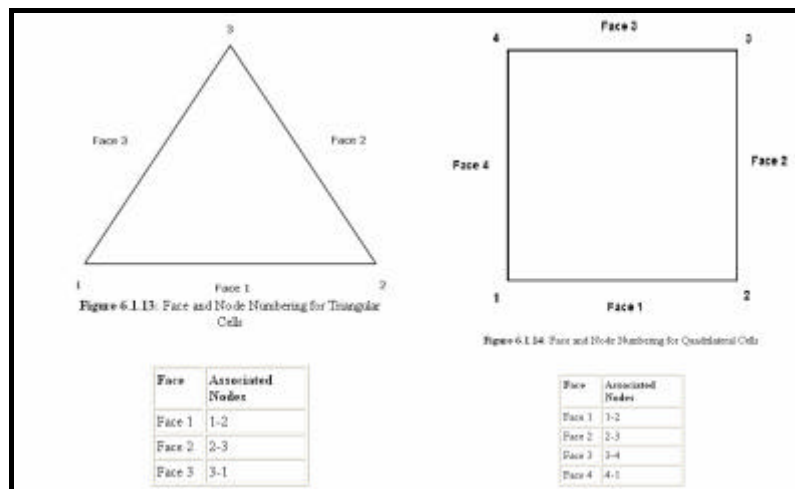


Ilustración 4.4. Características de los elementos de mallado en 2D. [22]

❑ Refinado

El mallado se puede refinar con el fin de minimizar el error numérico de la solución, también se pueden manipular parámetros y definir el tamaño de los elementos cerca de un punto, un borde, una superficie o en un sub-dominio. El refinado incluye varias opciones:

- Refinar el mallado por división de los elementos en dos o más elementos del mismo tipo.
- Refinar los elementos existentes para ser remplazados por los elementos existentes o por elementos de mayor orden.

La tercera opción es aquella en la que los elementos son divididos en dos o más elementos en algunos lugares y remplazados por elementos de mayor orden en otros lugares.

❑ Correr la simulación y visualización de resultados

Finalmente cuando se han introducido todos los datos al programa se corre la simulación. Las ecuaciones se encuentran acopladas y son de carácter no lineal, por ello, se adopta una estrategia de iteración. En los apartados sucesivos se exponen cuales son los datos introducidos y los resultados obtenidos para el modelo realizado.

❑ Criterios de selección para mallado óptimo

Se procede al mallado del sistema investigando las diferentes posibilidades ofrecidas por el programa.



- Aumentar el orden de los elementos. Empezamos con elementos cuadráticos. Aunque el programa ofrece más posibilidades no se estudiarán porque no se emplean comúnmente.
- Aumentar el número de elementos mediante refinado.

Empleando estos dos pasos los criterios para la selección del mallado óptimo son:

- **Tiempo Cálculo:** muchos problemas de flujo incluyen geometrías complejas. La creación de estructuras o bloque malla (elementos cuadriláteros o hexaédricos) para estos problemas puede suponer un consumo de tiempo extremadamente elevado, cosa que supondrá un elevado tiempo de cálculo. De aquí que la mayoría de veces se escoja celdas triangulares o tetraédricas.
- Se estudia el refinado para diferenciar las irregularidades numéricas de las físicas, ya que las segundas persisten independientemente del tipo de mallado impuesto
- Para seleccionar entre mallados válidos minimizar el tiempo de simulación o el número de elementos.

El criterio más relevante en la elección de la malla es la difusión numérica. Si se usa mallas triangulares / cuadriláteros, el flujo nunca puede ser consecuente con la malla. Esto sólo se produce en un flujo simple, como puede ser el flujo a través de un largo conducto, en los que la malla puede minimizar la difusión numérica.

❑ **Realización de la malla con Gambit**

Para la realización de un mallado con el programa Gambit, deben seguirse una serie de operaciones, tal y como se ven en la barra de operaciones:

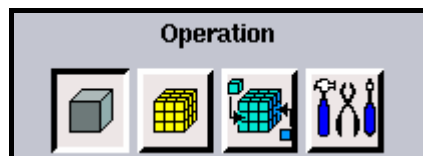


Ilustración 4.5. Barra de operaciones de Gambit.

❑ **Dibujar la Geometría.**

Se determinará cual es la geometría que mejor se adapta al modelo que queremos estudiar dependiendo de lo que se quiera lograr.

En el caso de este proyecto, como se tenía un quemador con geometría cilíndrica, se determinó que un estudio con 2D era suficiente, ya que el mismo tipo de estudio con dimensión 3D no mejoraría de forma ostensible el resultado, ya que el modelo real es una geometría cilíndrica sencilla.

Por ello se dibujo un rectángulo que correspondía a la mitad del quemador, ya que tan sólo es necesario realizar el estudio en la mitad, ya que el quemador presenta simetría en el eje central. Además en la parte inferior del rectángulo debe dibujarse el inyector por donde se introducirá el metano.



Para realizar la geometría cabe decir que se dibujan todos los puntos que determinarán nuestra geometría punto a punto, luego éstas deben unirse formando la forma definida, y por último se seleccionan todas las líneas y las convertimos en un área, de manera que forma una geometría que puede tratarse de forma conjunta (para realizar el mallado) o como líneas separadas (para aplicar las condiciones de contorno particulares). La geometría fue dibujada en milímetros (para poder dibujar bien el inyector, que es de dimensiones más reducidas que el quemador), esto es importante ya que posteriormente cuando la figura se exporte a Fluent, deberá escalarse la malla.

Las medidas dibujadas eran las siguientes.

- Rectángulo de 1,8 m de longitud y 0,225 m de altura, que determinará el área de entrada del aire. Relación $L/D = 1,8/0,45 = 4$
- Inyector: está situado a 0,05 m del eje de simetría en el lado izquierdo (todo ello se puede ver remarcado en la ilustración 4.8). Las dimensiones del inyector son de 0,05m x 0,05m.

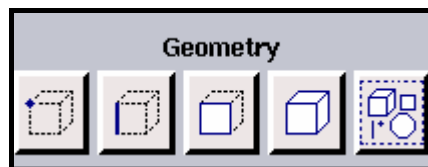


Ilustración 4.6. Barra de Geometría.

□ **Mallar.**

Una vez se dispone de la geometría dibujada formando ya una forma definida como un conjunto, se pasa a la realización de mallado del quemador. Para ello, determinaremos que la escala del mallado sea inferior en las zonas críticas de estudio, tal y como se puede ver en la figura, se determina un mallado más denso cuanto más nos acerquemos a la zona del inyector, así como en la zona de entrada del aire, ya que éstas son las zonas críticas de estudio ya que es el perfil en el que se producirá la mezcla aire-metano.

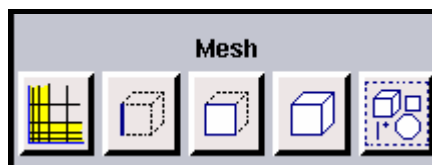


Ilustración 4.7. Barra del mallado.

Por otro lado, también conviene que se ponga un mallado más refinado en la zona cercana al eje de simetría, ya que es a lo largo de este eje donde se podrá ver la evolución de la llama. La zona que requiere menor detalle de mallado es la zona superior del quemador y más alejada de donde se producirá la mezcla.

Finalmente el tipo de malla escogido es celdas en forma cuadriláteros, ya que éste presenta mayor detalle que las triangulares, y siempre que la geometría lo permita, es más recomendable utilizar este tipo de elementos.

El número de mallas total es de 1615. Como se pudo comprobar este número de mallas, aunque no es demasiado elevado era suficiente para los cálculos que se requerían, permitiendo que el número de iteraciones en Fluent para cada cálculo no fuese demasiado grande, de forma que un proceso determinado no tomase demasiado tiempo.

Cabe destacar que aunque ésta fue la malla inicial para realizar la simulación, Fluent permite, en caso de creerlo necesario, realizar un refinamiento de la malla inicial, tal y como se ha hecho en este proyecto en algún caso concreto, para mejorar algún resultado específico.

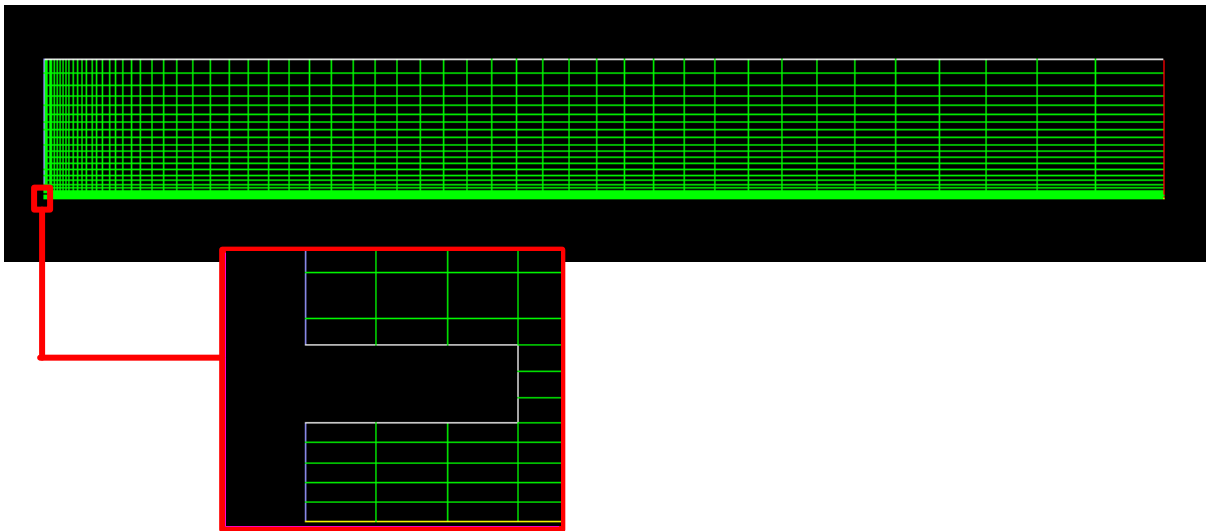


Ilustración 4.8. Mallado del quemador simulado.

❑ **Determinar las condiciones de Contorno.**

Una vez se da por finalizado el mallado del quemador, se debe pasar a definir las condiciones de contorno, indicando qué función tendrá cada zona del quemador:

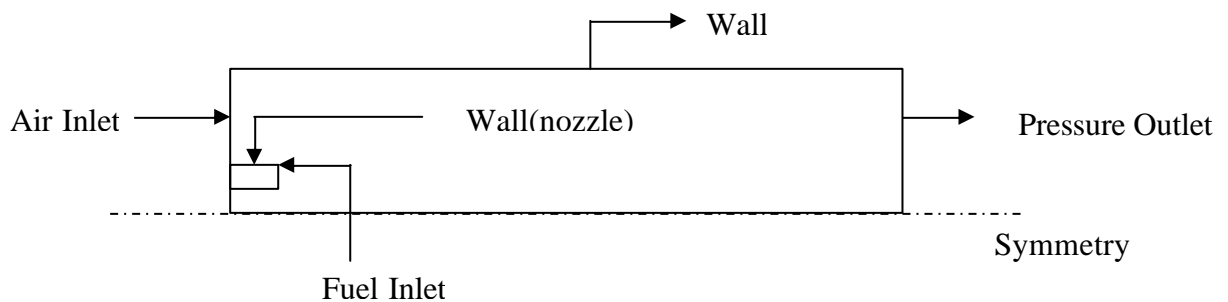


Ilustración 4.9. Condiciones de contorno del quemador.

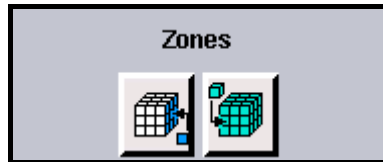


Ilustración 4.10. Barra Condiciones de contorno.

- *Symmetry*: Eje de simetría del quemador.
- *Air Inlet*: Se determina la zona de entrada de aire (el lado derecho excepto el inyector) con la opción de Gambit de Velocity Inlet (entrada de velocidad).
- *Fuel Inlet*: Se determina la zona de entrada de Metano, como un Velocity Inlet, y corresponde a la zona vertical del inyector.
- *Wall*: Se considera que la parte exterior (superior) actúa como pared.
- *Wall (nozzle)*: Corresponde a las paredes del inyector.
- *Pressure Outlet*: Corresponde a la zona final del Quemador, donde se determinarán las condiciones finales que tendrán lugar.

Para finalizar se selecciona toda la geometría ya definida y se determinará como fluido todo lo que se introduce.

Una vez se han realizado todos estos pasos ya se puede exportar la geometría como 2D, para que podamos abrir la aplicación desde Fluent.

Abrimos el modelo desde Fluent, lo escalamos en milímetros, y lo primero a realizar para comprobar que la malla se lee correctamente es hacer una comprobación de malla (Check), de forma que Fluent proporciona todas las características de la malla, éstas son:

```
Grid Check
Domain Extents:
  x-coordinate: min (m) = 0.000000e+00, max (m) = 1.800000e+00
  y-coordinate: min (m) = 0.000000e+00, max (m) = 2.250000e-01
Volume statistics:
  minimum volume (m3): 1.047198e-08
  maximum volume (m3): 3.353216e-03
  total volume (m3): 2.862759e-01
  minimum 2d volume (m3): 3.333333e-06
  maximum 2d volume (m3): 2.498386e-03
Face area statistics:
  minimum face area (m2): 5.000001e-07
  maximum face area (m2): 2.467726e-02
Checking number of nodes per cell.
Checking number of faces per cell.
Checking thread pointers.
Checking number of cells per face.
Checking face cells.
Checking bridge faces.
Checking right-handed cells.
Checking face handedness.
Checking for nodes that lie below the x-axis.
Checking element type consistency.
Checking boundary types:
Checking face pairs.
Checking periodic boundaries.
Checking node count.
Checking nosolve cell count.
Checking nosolve face count.
Checking face children.
Checking cell children.
Checking storage.
Done.
```

Ilustración 4.11. Comprobación de la malla de Fluent.



4.2.5. Fundamentos del flujo de fluidos. Ecuaciones

Sirven para solucionar iteraciones de CFD del flujo de fluidos y balances de energía, y están basadas en las ecuaciones de Navier Stokes. Los balances son generalizados, por eso el usuario puede influir en si añadir algunos elementos y en cuales no. El número de balances a solucionar también es definido por el usuario.

Los balances generalizados que son usados usualmente en los paquetes comerciales CFD de Fluent son las ecuaciones de Navier Stokes para la conservación de masa y momento, cuando hay flujo laminar sin transferencia de calor. Se solucionan ecuaciones adicionales de transferencia de calor, mezcla de especies o reacción o ecuación de conservación de especies o bien modelo $k - \epsilon$ para los casos turbulentos. Las ecuaciones básicas de estas ecuaciones se encuentran en la Guía de Uso de Fluent. [24]

- **Ecuaciones de Navier Stokes:**

- *Conservación de masa:*

La ecuación general para la conservación de masa, o ecuación de continuidad, se define como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = S_m \quad (4.2)$$

El término S_m contiene la masa añadida por los cambios de fase. En general, en la mayoría de las simulaciones, este término es igual a 0.

Para las **geometrías 2D simétricas**, la ecuación de continuidad viene dada:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_r)}{\partial r} + \frac{\rho u_r}{r} = S_m \quad (4.3)$$

donde x es la coordenada axial, r es la coordenada radial, u_x es la velocidad axial y u_r es la velocidad radial.

- *Conservación del momento:*

La ecuación para la conservación del momento en la dirección i y en una referencia no acelerada viene dada por:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial t_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + F_i \quad (4.4)$$

En este balance p es la presión estática, t_{ij} es el tensor de tensión, ρg_i es la fuerza de la gravedad. F_i es un componente de las fuerzas externas; esto puede incluir fuerzas de la interacción de fases, fuerzas centrífugas, fuerzas de Coriolis. En nuestra simulación estas eran cero.



El tensor de tensiones para un fluido Newtoniano es definido por:

$$t_{ij} = \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \delta_{ij} \quad (4.5)$$

aquí μ es la viscosidad molecular; el segundo término del lado de la derecha de la ecuación es el efecto de la dilatación del volumen.

Para las **geometrías 2D simétricas**, la ecuación de continuidad viene dada:

$$\frac{\partial(r u_x)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r r u_x u_x)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r r u_r u_x)}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \bar{u}) \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial x} \right) \right] + F_x$$

y

(4.6)

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r u_r)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r r u_x u_r)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r r u_r u_r)}{\partial r} = & -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(\frac{\partial u_r}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) \right] \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \bar{u}) \right) \right] - 2 \mu \frac{u_r}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} (\nabla \cdot \bar{u}) + r \frac{u_z^2}{r} + F_r \end{aligned} \quad (4.7)$$

donde

$$\nabla \cdot \bar{v} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} \quad (4.8)$$

▪ **Modelos Turbulentos:**

Para casos turbulentos se utiliza el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ para realizar la simulación. El modelo $k - \epsilon$ es un modelo semi-empírico; su ecuación deriva de las ecuaciones de Reynolds-Average Navier-Stokes. Las mayores asunciones en este modelo es que se trata de un flujo totalmente turbulento y con efecto de la viscosidad negligible, además únicamente puede utilizarse para flujos totalmente turbulentos.

Con Reynolds averaging las variables para solucionar las ecuaciones de Navier Stokes son descompuestas en los componentes, de significado \bar{u}_i y las fluctuaciones \bar{u}'_i . Se aplica esto a la ecuación estándar de Navier-Stokes y, el resultado que se obtiene es:

$$\frac{\partial(r u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(r u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \right] + \frac{\partial(-r \bar{u}'_i \bar{u}'_j)}{\partial x_j} \quad (4.9)$$

Las velocidades y otras soluciones son ahora representadas con los valores del tiempo de cálculo, los efectos de turbulencia son representadas por el "Stress de Reynolds", $(-r \bar{u}'_i \bar{u}'_j)$, que es modelado por la hipótesis de Boussinesq:



$$- \mathbf{r} \overline{u_i' u_j'} = \mathbf{m} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\mathbf{r} k + \mathbf{m} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \mathbf{d}_{ij} \quad (4.10)$$

La viscosidad turbulenta, \mathbf{m} , es definido con k , la energía de turbulencia cinética (turbulent kinetic energy) y \mathbf{e} , que es el factor de disipación. El modelo $k - \mathbf{e}$ fue desarrollado y descrito por Launder y Spalding (1972):

$$\mathbf{m} = \mathbf{r} C_m \frac{k^2}{\mathbf{e}} \quad (4.11)$$

Esta ecuación fue adaptada de las ecuaciones de transporte:

$$\frac{\partial(\mathbf{r} k)}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{r} u_i k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mathbf{m} + \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + G_k + G_b - \mathbf{r} \mathbf{e} \quad (4.12)$$

$$\text{y } \frac{\partial(\mathbf{r} \mathbf{e})}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{r} u_i \mathbf{e})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mathbf{m} + \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}_e} \right) \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial x_i} \right] + C_{1e} \frac{\mathbf{e}}{k} \{ G_k + (1 - C_{3e}) G_b \} - C_{2e} \mathbf{r} \frac{\mathbf{e}^2}{k} \quad (4.13)$$

en estas ecuaciones, G_k es la generación de la energía de la turbulencia cinética, k se produce por el estrés turbulento, y es definido por:

$$G_k = - \mathbf{r} \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (4.14)$$

G_b es la generación de la energía de la turbulencia cinética,

$$G_b = \mathbf{b} g_i \frac{\mathbf{m}}{\text{Pr}_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (4.15)$$

Aquí, Pr_t es el número adimensional de Prandtl para temperatura o entalpía, \mathbf{b} es el coeficiente del término de expansión:

$$\mathbf{b} = - \frac{1}{\mathbf{r}} \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial T} \right)_p \quad (4.16)$$

Las constantes del modelo, C_{1e} , C_{2e} , C_m , \mathbf{s}_e , \mathbf{s}_k se utilizaron con los valores que por defecto utiliza Fluent. Éstos eran:

$$C_{1e}=1,44, C_{2e}=1,92, C_m=0,09, \mathbf{s}_k=1,0 \text{ y } \mathbf{s}_e=1,3 \text{ y } \text{Pr}_t=0,85.$$

Los valores por defecto fueron establecidas por el trabajo experimental con aire y agua y fueron probadas para el trabajo en un amplio rango de condiciones de contorno (Launder y Spalding, 1972). Los resultados de la simulación discutidos en este proyecto, han sido determinados usando estos valores por defecto.



▪ **Ecuaciones de Energía:**

La ecuación de energía en Fluent se soluciona mediante la ecuación para el transporte de la temperatura estática. La ecuación de la temperatura se obtiene de la ecuación de la entalpía, y sólo se soluciona en casos especiales, tomando la temperatura como variable dependiente. La ecuación de la entalpía se define como:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (k + k_t) \frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{\partial \sum_j h_j J_j}{\partial x_i} + \frac{Dp}{Dt} + (t_{ik})_{eff} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + S_h \quad (4.17)$$

En esta ecuación S_h incluye calor de la reacción química, intercambio de calor. k_t se define como la conductividad debida al transporte turbulento:

$$k_t = \frac{c_p m_t}{Pr_t} \quad (4.18)$$

y la entalpía h es definida como,

$$h = \sum_j m_j h_j \quad (4.19)$$

donde m_j es la masa de especies j ,

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j} dT \quad (4.20)$$

Otra parte de las ecuaciones de transferencia de calor es la transferencia a través de partículas sólidas sin malla.

▪ **Ecuaciones Transporte de Especies:**

Cuando se escoge en Fluent la opción de solucionar ecuaciones de especies químicas, Fluent predice la fracción másica para cada especie, Y_i , mediante la solución de una ecuación de convección-difusión para cada especie. Esta ecuación de conservación viene dada por:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (4.21)$$

donde R_i es el factor neto de formación de la especie i en la reacción química y S_i es el factor añadido por la adición de las fases dispersas. Una ecuación de este tipo se puede solucionar para $N-1$ especies, donde N es el número total especies químicas.

➤ *Difusión Masa en flujos laminares:*

En la ecuación superior \vec{J}_i es el flujo de difusión de la especie i , debido al gradiente de concentración. Por defecto Fluent utiliza una aproximación, definida como



$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \quad (4.22)$$

donde $D_{i,m}$ es el coeficiente de difusión de la especie i en la mezcla.

➤ *Difusión Masa en flujos Turbulentos:*

En los flujos turbulentos, la difusión de masa sigue la forma:

$$\vec{J}_i = \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{S_{Cr}} \right) \nabla Y_i \quad (4.23)$$

donde S_{Cr} es el número turbulento de Schmidt ($\frac{\mu_t}{\rho D_t}$) donde μ_t es la viscosidad turbulenta y D_t es la difusividad turbulenta. Por defecto S_{Cr} es 0,7.

➤ *Tratamiento del Transporte de Especies en la Ecuación de Energía.*

Para muchos flujos con mezcla de varios componentes, el transporte de la entalpía es debida a la difusión de especies:

$$\nabla \cdot \left[\sum_{i=1}^n h_i \vec{J}_i \right] \quad (4.24)$$

esto puede tener un efecto significativo en la entalpía y debería no ser negligible. En particular, cuando interviene el número de Lewis:

$$Le_i = \frac{k}{\rho c_p D_{i,m}} \quad (4.25)$$

➤ *Formulación general para la simulación de reacciones.*

El factor de la reacción que aparece en la ecuación del transporte de especies se define en Fluent por uno de los siguientes tres modelos:

- Laminar finite-rate model.
- Eddy-dissipation model.
- Eddy-dissipation-concept (EDC) model.

En nuestro caso se utilizará el segundo modelo, el Eddy-dissipation model, donde el factor de reacción que se asume es controlado por la turbulencia, de aquí que no se utilicen los costosos cálculos cinético químicos de Arrhenius.

La mayoría de fuels se queman rápidamente, y la reacción se controla por la mezcla turbulenta. En muchos casos, se dice que la combustión ha de ser limitada por la mezcla. Fluent proporciona una interacción del modelo turbulento-químico, basado en el trabajo de Magnussen y Hjertager, llamado eddy-dissipation model. El valor neto



de producción de la especie i , debido a la reacción r , $R_{i,r}$ se da por la menor de las siguientes dos expresiones:

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A r \frac{e}{k} \min \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad (4.26) \quad (4.27)$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B r \frac{e}{k} \frac{\sum p Y_p}{\sum_j^N v''_{j,r} M_{w,j}}$$

donde Y_p es la fracción másica de un producto de la reacción, P . Y_R es la fracción másica del reactante, R . A es una constante = 0,4 y B es una constante = 0,5.

En los procesos de combustión la turbulencia que es presente es $k/e > 0$ y no es necesaria una ignición para iniciar la combustión. Esto usualmente se acepta para las llamas de no-premezcla, pero en las de premezcla, los reactantes quemarán tan pronto como entren en el dominio computacional, por encima de la corriente estabilizadora de llama. Para remediarlo, Fluent utiliza conjuntamente las ecuaciones del modelo eddy-dissipation y las ecuaciones de Arrhenius, que en la práctica actúa como un iniciador cinético.

▪ **Solución Numérica:**

Las ecuaciones diferenciales para la conservación de momento, y escalares como masa, energía y turbulencia se solucionan de forma integral. Fluent utiliza una técnica basada en el control de volumen, que consiste en tres pasos:

- División del dominio en volúmenes discretos usando una malla computacional.
- Integración de las ecuaciones que gobiernan volúmenes de control para crear ecuaciones algebraicas con incógnitas como presión, velocidad y escalares.
- Solución a las ecuaciones discretizadas.

Las ecuaciones de gobierno se solucionan de forma secuencial. El hecho de que estas ecuaciones se acoplan hace necesario diversas iteraciones para encontrar la solución antes de convergir. La solución consiste en los siguientes 7 pasos:

- Las ecuaciones de momento para todas las direcciones se solucionan cada una usando valores de presión (inicialmente se usa la condición de contorno).
- Las velocidades obtenidas pueden no satisfacer localmente la ecuación de continuidad. Usando la ecuación de continuidad y la ecuación del momento lineal se deriva una ecuación “tipo-Poisson” para la corrección de la presión.
- Las ecuaciones k y e son solucionadas con el campo correcto de velocidad.
- Todas las otras ecuaciones (energía, conservación de las especies,...) se solucionan usando valores apropiados de las variables.
- Las propiedades de fluido se calculan al momento.
- No se encuentra ningún término extra entre fases.
- Se necesita una revisión para que converja.



4.2.6. Elección del modelo

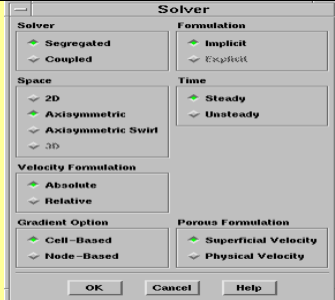
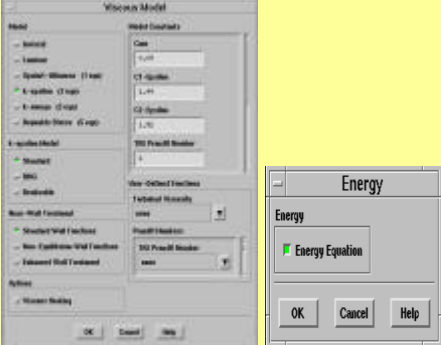

<p>Tipo de Modelo</p> <p>Se define el Dominio como simetría y se deja por defecto el modelo de Resolución (segregated).</p>											
<p>Modelo Viscoso y Energía</p> <p>Se selecciona el Modelo de Turbulencia $k - \epsilon$. (k-epsilon 2eqn).</p> <p>Se permite que haya transferencia de calor activando la ecuación de energía.</p>											
<p>Modelo de las especies</p> <p>La elección en el siguiente apartado son:</p> <table border="1" data-bbox="256 1010 863 1267"> <thead> <tr> <th>Modelos</th><th>Tipo Elegido</th></tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Modelo</td><td>Transporte de especies químicas</td></tr> <tr> <td>Reacciones</td><td>Volumetric</td></tr> <tr> <td>Interacción Turbulencia-Química</td><td>Eddy-Dissipation</td></tr> <tr> <td>Condiciones de Contorno</td><td>Se cambia la zona de simetría a condiciones de eje</td></tr> </tbody> </table> <p>El modelo Eddy-Dissipation computa el valor de la reacción asumiendo que la cinética son más rápidos comparado con el valor de los reactantes que son mezclados por fluctuaciones turbulentas.</p> <p>En el modelo asimétrico, la línea central debe ser tratada usando las condiciones de contorno de eje, en lugar de condición de simetría.</p>	Modelos	Tipo Elegido	Modelo	Transporte de especies químicas	Reacciones	Volumetric	Interacción Turbulencia-Química	Eddy-Dissipation	Condiciones de Contorno	Se cambia la zona de simetría a condiciones de eje	 <p>Mezcla Materiales: <i>Corresponde a una lista de mezclas químicas que existen en la librería de Fluent . Cuando se selecciona una de las mezclas predefinidas, se accede a una completa descripción del sistema de reacción. Las especies químicas del sistema y sus propiedades físicas y termodinámicas son definidas en la selección de la mezcla de materiales. Se pueden alterar la selección de mezcla de materiales o modificar las propiedades de las especies.</i></p>
Modelos	Tipo Elegido										
Modelo	Transporte de especies químicas										
Reacciones	Volumetric										
Interacción Turbulencia-Química	Eddy-Dissipation										
Condiciones de Contorno	Se cambia la zona de simetría a condiciones de eje										

Tabla 4.2. Elección del Modelo. [21] [22]



4.2.7. Materiales

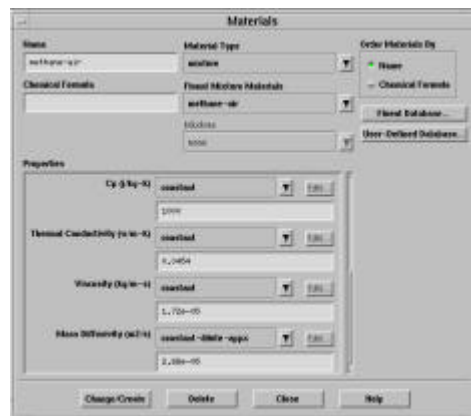
El panel de Materiales muestra la mezcla de materiales, aire-metano, que ha sido impuesto en el panel de Species Model. Las propiedades de esta mezcla de materiales han sido trasladados desde la base de datos de Fluent, y podría modificarse en caso de ser necesario.

Por defecto, con una mezcla de materiales Fluent utiliza propiedades constantes, en nuestro caso será necesario variar algunas de ellas: [21] [22]

Panel Materiales:

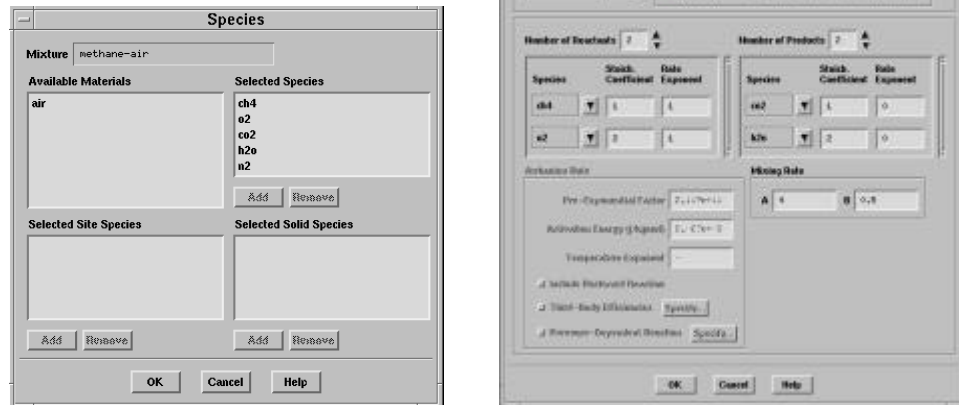


Panel Materiales mostrando propiedades:

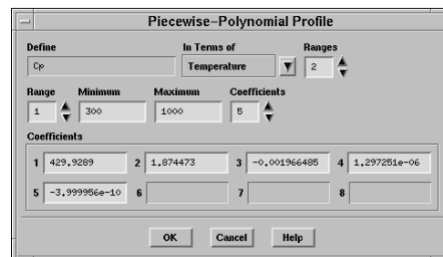


- *Densidad:* seleccionamos incompresible-ideal-gas, que varía con la temperatura y composición.
- *Especies Mezcladas:* si se abre se puede ver el panel de especies que nos permite seleccionar alguna de ellas (aire, CH₄, O₂, CO₂, H₂O, N₂) o añadir alguna más a la composición de mezcla.
- *Panel de Reacciones:* en este panel se define las reacciones que participan en el modelo a simular, en este caso $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$, definiendo cada especie con su correspondiente coeficiente estequiométrico. El modelo de reacción eddy-dissipation ignora la cinética química y usa sólo los parámetros del coeficiente de mezcla en el panel de Reacciones. El coeficiente de Arrhenius está desactivado (El coeficiente de Exponente y de Arrhenius están incluidos en la base de datos y son utilizados cuando se usa el modelo alternativo finite rate/eddy-dissipation).





- *Calor específico:* se selecciona la opción mixing-law como método de calor específico en la opción de mezcla aire-metano. Se varía la dependencia con la temperatura de cada especie individualmente. En el apartado del tipo de materiales se selecciona fluido y para cada especie de la mezcla se selecciona piecewise-polynomial en el calor específico. Esto abre un panel que por defecto muestra los coeficientes que describen la variación de la C_p con la temperatura, es decir el polinomio $C_p(T)$ de la base de datos de Fluent.



- El resto de propiedades las dejamos como constantes con el valor que hay por defecto: *Conductividad Térmica* (0,0454 w/mk).

Viscosidad ($1,72 \cdot 10^{-5}$ kg/ms)

Difusividad de masa ($2,88 \cdot 10^{-5}$ m²/s)

Estos modelos son aceptables porque el flujo es fuertemente turbulento. Las propiedades del transporte molecular juega un papel secundario comparado con el transporte turbulento.



4.2.8. Condiciones de contorno

Para imponer las condiciones se utiliza el panel de Boundary Conditions. [21]

1. Se convierte la zona de simetría en eje para prevenir dificultades numéricas en la zona donde el radio tiende a cero. [22]



2. Se escogen las condiciones de contorno del aire (definido como un velocity-inlet). Se pone :

- Velocidad: 0,5 m/s. (constante)
- Temperatura: 300 °K (constante)
- Método de Turbulencia: Intensidad y Diámetro Hidráulico:
 - i. Intensidad Turbulencia : 1%.
 - ii. Diámetro Hidráulico: 0,22 m.
- Fracciones Másicas Especies: en este caso O₂: 0,21 y el resto 0.

3. Se determinan las condiciones de contorno del metano (velocity-inlet).

- Velocidad: 90 m/s. (constante)
- Temperatura: 300 °K (constante)
- Método de Turbulencia: Intensidad y Diámetro Hidráulico:
 - i. Intensidad Turbulencia : 10%.
 - ii. Diámetro Hidráulico: 0,01 m.
- Fracciones Másicas Especies: en este caso CH₄ 1 y el resto 0.

Tratamiento de las condiciones del Velocity Inlet:

Cuando definimos como una entrada de velocidad definimos el flujo que entra al dominio físico del modelo. Fluent utiliza los componentes de velocidad y las cantidades escalares que se definen como condición de contorno para computar el flujo de masa entrante:

$$\dot{m} = \int \rho \vec{v} \cdot d\vec{A}$$



Condiciones de entrada del Aire:

Velocity Inlet

Zone Name: air-inlet

Velocity Specification Method: Magnitude, Normal to Boundary

Reference Frame: Absolute

Velocity Magnitude (m/s): 0.5 constant

Temperature (K): 300 constant

Turbulence Specification Method: Intensity and Hydraulic Diameter

Turbulence Intensity (%): 10

Hydraulic Diameter (m): 0.22

Species Mass Fractions:

ch4	0	constant
o2	0.23	constant
co2	0	constant
h2o	0	constant

OK Cancel Help

Condiciones de entrada del metano:

Velocity Inlet

Zone Name: fuel-inlet

Velocity Specification Method: Magnitude, Normal to Boundary

Reference Frame: Absolute

Velocity Magnitude (m/s): 90 constant

Temperature (K): 300 constant

Turbulence Specification Method: Intensity and Hydraulic Diameter

Turbulence Intensity (%): 10

Hydraulic Diameter (m): 0.01

Species Mass Fractions:

ch4	1	constant
o2	0	constant
co2	0	constant
h2o	0	constant

OK Cancel Help

4. Se determinan las condiciones de la salida del quemador: *Pressure-outlet*.

- Presión: 0 pascal. (constante)
- Temperatura: 300 °K (constante)
- Método de Turbulencia: Intensidad y Diámetro Hidráulico:
 - i. Intensidad Turbulencia : 10%.
 - ii. Diámetro Hidráulico: 0,45 m.
- Fracciones Másicas Especies: en este caso O₂: 0,21 y el resto 0.

Tratamiento condiciones de Contorno de Pressure Outlet:

La pressure outlet requiere la especificación de una presión estática a la salida. El valor de la presión estática especificada se utiliza mientras el flujo es subsónico. Todas las otras cantidades de flujo son extrapoladas desde el interior.

Pressure Outlet

Zone Name: pressure-outlet-9

Gauge Pressure (pascal): 0 constant

Backflow Total Temperature (K): 300 constant

Backflow Direction Specification Method: Normal to Boundary

Turbulence Specification Method: Intensity and Hydraulic Diameter

Backflow Turbulence Intensity (%): 10

Backflow Hydraulic Diameter (m): 0.45

Species Mass Fractions:

ch4	0	constant
o2	0.23	constant
co2	0	constant
h2o	0	constant

Target mass-flow rate

OK Cancel Help

5. Ahora se determinarán las condiciones de las paredes:

- Pared Exterior: se selecciona la condición de Temperatura: 300 °K.
- Inyector: se selecciona Flujo de Calor: 0 W/m², ya que se trata de una pared adiabática. El resto de valores se dejan por defecto.



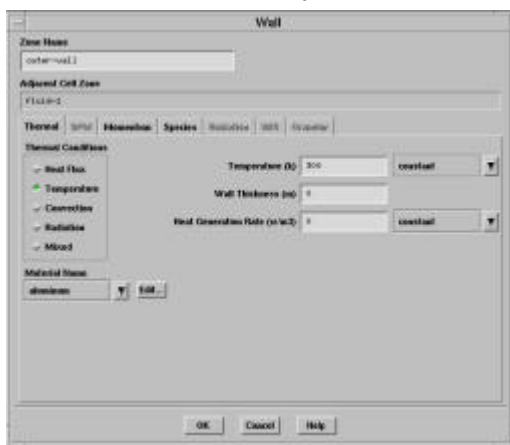
Tratamiento de las condiciones de Contorno de Pared:

Las condiciones de contorno de pared se utilizan en contornos de fluido y regiones sólidas. En flujos viscosos, la condición de pared se utiliza por defecto, pero se puede especificar una componente tangencial de la velocidad en términos de traslación o rotación.

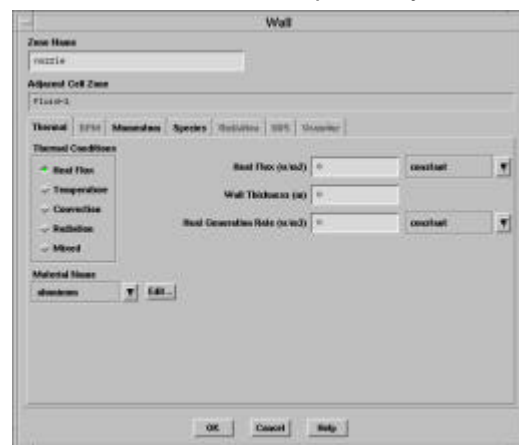
Heat Flux: para fijar una condición de flujo de calor. Se define pared adiabática poniendo valor 0 en esta condición.

Temperatura: para seleccionar una condición de temperatura fija. Es necesario especificar la temperatura de la superficie de la pared.

Condiciones de la pared Exterior:



Condiciones de la pared inyector:



4.2.9. Metodología para obtener resultados:

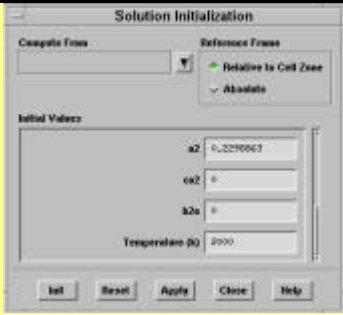
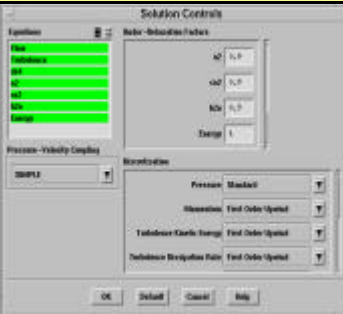

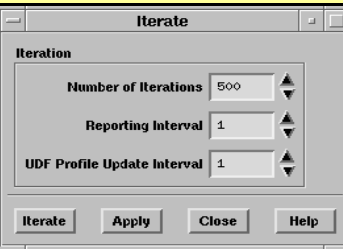

<p>Inicialización de las variables</p> <p>Con la opción <i>Solve? Initialize? Initialize</i>, seleccionamos todas las zonas, ajustamos el valor inicial de la temperatura a 2000 °C, inicializando el flujo usando una alta temperatura y un contenido diferente de cero del fuel permite que la reacción de combustión empiece. La condición inicial actúa como un estímulo numérico para incitar la mezcla aire-metano.</p>	
<p>Control de Soluciones</p> <p>En <i>Solve? Controls? Solution</i>, dejamos los parámetros que por defecto presenta Fluent. Para un modelo de combustión puede ser necesario reducir la bajo-relajación para estabilizar la solución. En este caso reducimos los valores de Under-Relaxation Factors de cada especie a 0,9.</p>	
<p>Monitor Residual</p> <p>En el apartado <i>Solve? Monitor? Residual</i>, se activa la representación de los residuales para seguir la evolución que sigue la iteración. Marcamos el criterio de convergencia de las variables a 0,001.</p>	
<p>Iteración</p> <p><i>Salvamos el caso: File? Write? Case.</i> Se guardará el caso (nom.cas) con los valores que se han impuesto.</p> <p><i>Iniciar la iteración:</i> empezamos a iterar imponiendo 1000 iteraciones: <i>Solve? Iterate.</i> La solución converge antes de las 500 iteraciones.</p>	
<p>Obtener Soluciones</p> <p><i>Guardamos de nuevo el caso:</i> una vez se itera se ha de volver a regrabar el caso, cambiado el nom.cas o por <i>nom.dat</i>, en <i>File? Write? Case&Data</i>. Se sobrescribe el caso anterior por este nuevo.</p> <p><i>Obtener Soluciones:</i> una vez introducido los valores, se pueden obtener los contornos de cada parámetro a estudiar. Todos ellos se podrán ver en el apartado siguiente. Todo ello en <i>Display? Contours</i>.</p>	

Tabla 4.3. Pantallas y metodología para obtener resultados. [21] [22]



4.2.10. Resultados

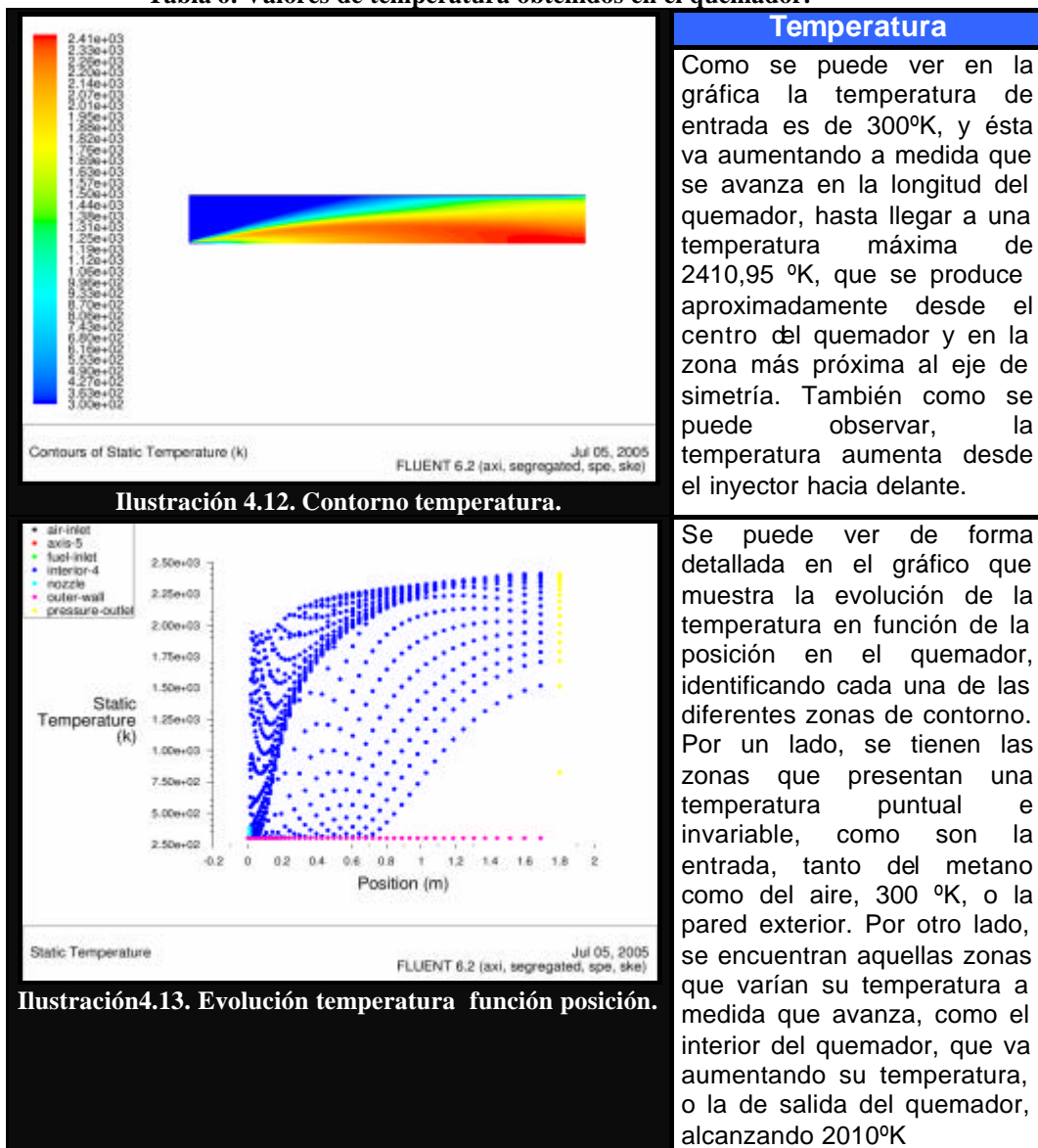
Partiendo de los datos iniciales que se han ido detallando en los diferentes apartados anteriores se mostrarán los resultados principales mediante tablas y gráficas que nos facilita Fluent y que se quería estudiar.

□ *Temperatura:*

Para obtener el resultado se utiliza la opción de Static Temperature ? Mass-average temperatura. Este cálculo se computa como:
$$\bar{T} = \frac{\int T \mathbf{r} \cdot d\mathbf{A}}{\int \mathbf{r} \cdot d\mathbf{A}}$$

Entrada (°K)	Interior (°K)	Salida Quemador (°K)
300	930,20	2010

Tabla 6. Valores de temperatura obtenidos en el quemador.

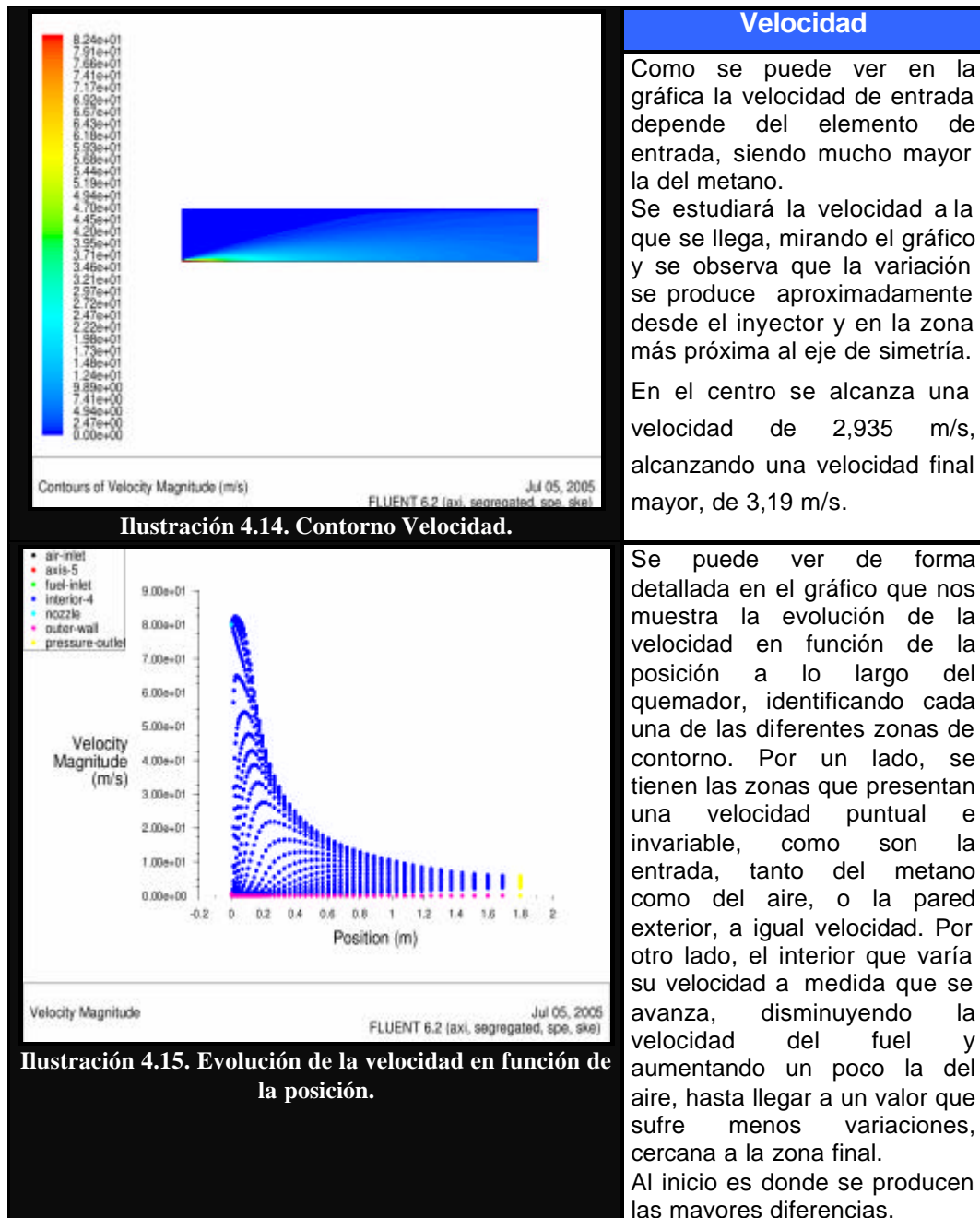


□ **Velocidad:**

En este caso se utiliza la opción de cálculo Velocity Magnitude? AreaWeighted Average, ya que el cálculo que se realiza es: $\bar{u} = \frac{1}{A} \int u dA$

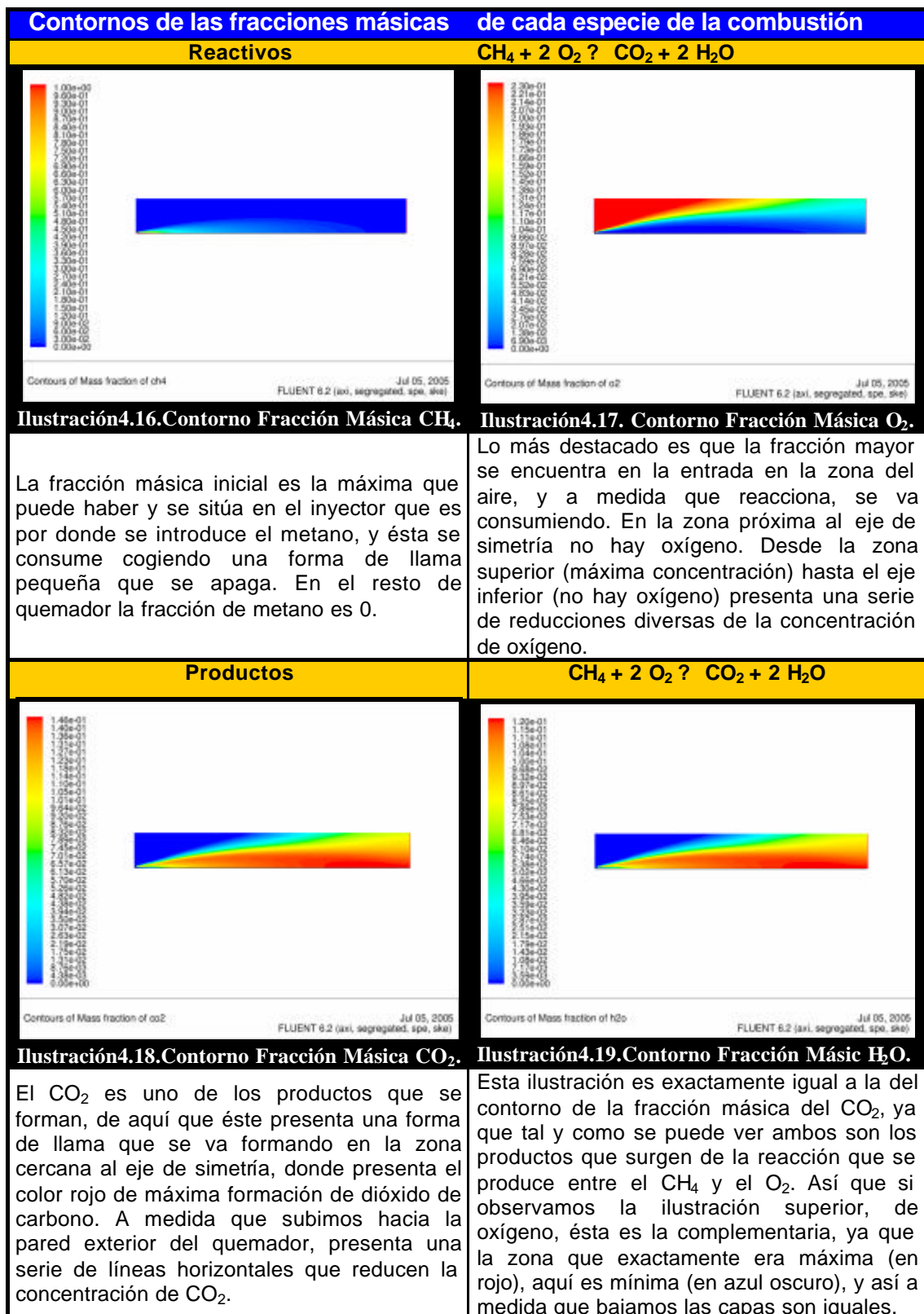
Entrada (m/s)	Interior (m/s)	Salida Quemador (m/s)
Aire: 0,05 Fuel: 80	2,935	3,1919

Tabla 4.4. Valores de la velocidad obtenidos en el quemador.



❑ **Fracciones Molares:**

Se selecciona cada especie de las que participan en la reacción de combustión por separado y obtenemos las gráficas de las 5 especies.



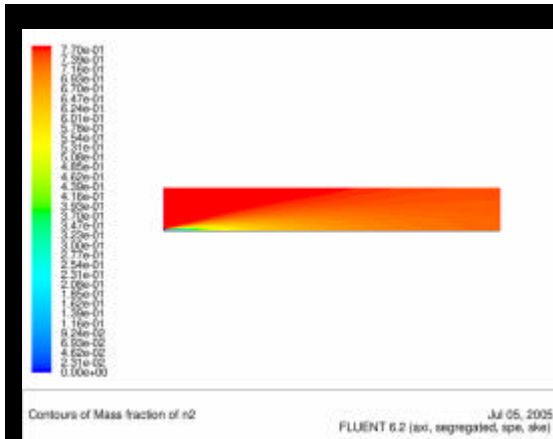


Ilustración 4.20. Contorno Fracción Másica N₂.

En esta ilustración lo que podemos observar es el contorno de la fracción másica de N₂, un componente que entra con la entrada de aire en el quemador. Tal y como se puede ver la zona de máxima concentración (rojo) la encontramos precisamente en la entrada, a medida que se avanza por el quemador, ésta se va reduciendo y tomando una tonalidad más anaranjada hasta llegar a la zona de salida del quemador. Por otro lado, en la zona cercana al inyector, que tenía máxima concentración de metano (ilustración 4.16), aquí es la zona que presenta una menor concentración, obteniéndose a misma forma de llama pequeña que se consume, pero en este caso aumentando la concentración.

□ **Turbulencia:**

En este caso lo que se mostrará son las gráficas que nos mostrarán los modelos de turbulencia que se aplicaron al modelo para que se produjeron una buena mezcla entre el aire y el combustible. En este caso en la tabla que se muestra a continuación se muestra los valores obtenidos en las diversas zonas según el tipo de modelo.

	Entrada (m ² /s ²)	Interior (m ² /s ²)	Salida Quemador (m ² /s ²)
Turbulence kinetic energy (k) m²/s²	Aire: 4,46·10 ⁻⁵ Fuel: 95,58	3,64	1,56
Turbulence Dissipation Rate (epsilon) m²/s³	Aire: 0,00042 Fuel: 324367,6	831,93	13,227

Tabla 4.5. Valores de Turbulencia según el modelo y la zona del quemador en la que se encuentre.

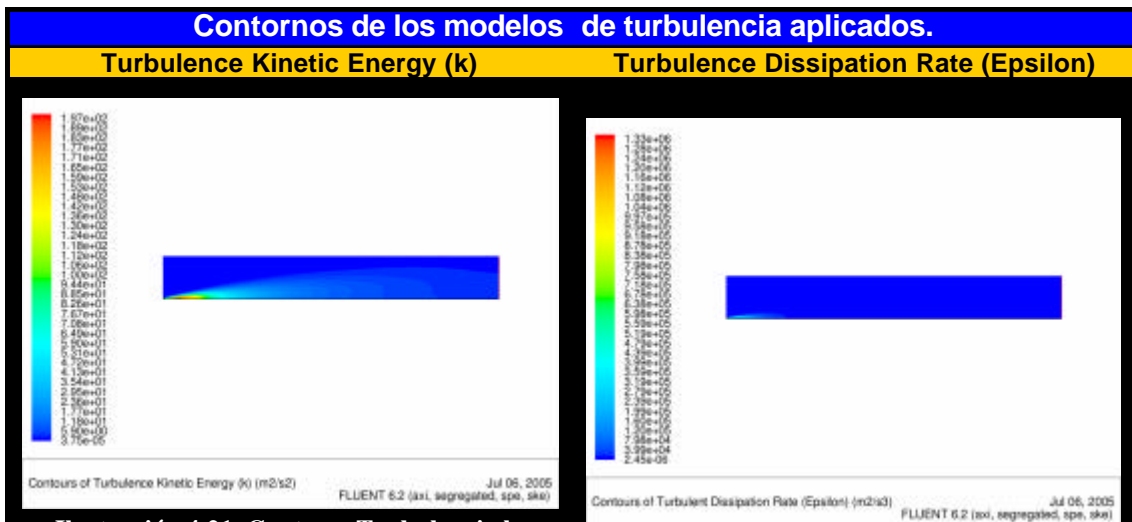


Ilustración 4.21. Contorno Turbulencia k.

En este caso se forma una pequeña llama cerca del inyector, aquí presenta la mayor turbulencia aplicada, porque es la zona de mezcla de los reactivos. En el resto del quemador, la turbulencia presenta un valor muy pequeño.

Ilustración 4.22. Contorno Turbulencia Epsilon.

En este caso también presenta una zona con una concentración algo mayor que en el resto del quemador. Pero en este caso en la zona cercana al inyector presenta varios órdenes de magnitud mayor. En el resto del quemador presenta turbulencia mínima.



Propiedades	A	B 10^{-3}	D 10^{-5}
CO ₂	5,457	1,045	1,157
H ₂ O	3,470	1,450	0,121
O ₂	3,639	0,500	0,227
N ₂	3,280	0,593	0,040

Tabla 4.12. Valores de los coeficientes para el cálculo de la capacidad calorífica.

Se combinan tal y como se muestra a continuación:

$$A = \sum_i n_i A_i = 1(5,457) + 2(3,470) + 0,4(3,639) + 9,03(3,280) = 43,471$$

$$B = \sum_i n_i B_i = 9,502 \times 10^{-3}$$

$$D = \sum_i n_i D_i = -0,645 \times 10^{-5}$$

las ecuaciones (A) y (B) se combinan y se solucionan para encontrar T.

$$T = 298,15 - \frac{\Delta H_{298}^0}{\langle C_p^0 \rangle_H}$$

como que las capacidades caloríficas dependen de T, evaluaremos el valor de la $\langle C_p^0 \rangle_H$ para un valor de $T > 298,15$ °C, y sustituiremos el resultado en la ecuación de arriba. Esto nos conducirá a un nuevo valor de T para el que volvemos a recalcular $\langle C_p^0 \rangle_H$. Seguiremos iterando hasta un valor de convergencia final, en este caso:

$$T = 2066^\circ K$$

Se sigue el mismo procedimiento e iremos calculando el valor la temperatura de combustión para diferentes cantidades de exceso de aire, para poder calcular la evolución que sigue la temperatura en función del exceso de aire que añadimos. Los resultados obtenidos fueron:

Exceso de Aire (%)	Tª Combustión(°K)
0	2308
5	2240
10	2181
15	2122
20	2066
25	2012
26	2008
27	2001
28	1994
30	1968
40	1874
50	1790

Tabla 4.13. Temperatura de combustión según % exceso de aire.



❑ Cálculo Con Fluent:

A continuación se realizará el cálculo mediante el programa Fluent. Para ir variando el exceso de oxígeno, según los diferentes casos a estudiar, se comprobó que se debía ir variando las velocidades de entrada del combustible inyectado o bien del aire, ya que tal y como se verá a continuación con este parámetro se controlaba la relación molar entre los diferentes caudales.

Esto se muestra a continuación, con el cálculo para el mismo exceso de un 20%:

Se tiene: Moles de $\text{CH}_4 = 1$

Moles de $\text{CO}_2 = 2,4$

Cantidad de O_2 que tiene el aire es de 0,21.

La proporción molar entre ambos (Aire: Metano) es de: 11:428 a 1.

Para calcular esto se calculará los flujos másicos de cada fluido en la entrada del quemador. Primero se deben calcular las áreas por las que circularán:

$$\begin{cases} R_1 = 0,225m \\ R_2 = 0,005m \end{cases}$$

$$\text{Área Aire: } p \cdot (R_1 - R_2)^2 = (0,225 - 0,005)^2 = 0,152m^2$$

$$\text{Área Metano: } p \cdot (R_2)^2 = (0,005)^2 = 7,854 \cdot 10^{-5} m^2$$

Los caudales los calcularemos como $Q = \bar{v} \cdot A$

$$\begin{cases} \text{Velocidad Aire} = 0,05 \\ \text{Velocidad del Metano} = 84,8 \end{cases}$$

$$\text{Caudal Aire: } 0,05 \cdot 0,152 = 0,076m^3 / s$$

$$\text{Caudal Metano: } 84,8 \cdot 7,854 \cdot 10^{-5} = 6,66 \cdot 10^{-3} m^3 / s$$

Finalmente, para encontrar la relación molar dividimos uno entre otro:

$\text{Caudal Aire} / \text{Caudal Metano} = 0,076 / 6,66 \cdot 10^{-3} = 11,42$ que es la relación que habíamos calculado de forma teórica.

Para ir calculando según los diferentes porcentajes de exceso se deben ir variando las velocidades de entrada del metano o del aire, ya que este parámetro lo podemos controlar nosotros en Fluent. Las diferentes velocidades son:

- Calculamos la velocidad del metano, dejando fijo Velocidad Aire = 0,05 m/s:



Exceso de Aire (%)	Velocidad metano (m/s)
0	101,5
5	96
10	92,5
15	88,2
20	84,8
25	81,3
26	80,66
27	80,5
28	80
30	78,2
40	72,5
50	68

Tabla 4.14. Velocidad de metano según % exceso de aire.

- Calculamos la velocidad del aire, dejando fijo Velocidad Metano = 80 m/s:

Exceso de Aire (%)	Velocidad Aire (m/s)
0	0,395
5	0,42
10	0,433
15	0,454
20	0,475
25	0,492
26	0,496
27	0,498
28	0,5
30	0,512
40	0,55
50	0,59

Tabla 4.15. Velocidad del aire según % exceso de aire.

Para realizar el cálculo era indiferente escoger una opción u otra, finalmente se optó por ir variando en Fluent las velocidades del metano, aunque se comprobó con un par de casos que con las velocidades del aire que le correspondía se obtenía exactamente el mismo valor de temperatura de llama, tal y como se ha mostrado de forma teórica.

Este estudio se realizó por duplicado, en el primer caso se utilizó el mallado inicial con el que se han realizado todos los cálculos, con éste se obtuvieron unos resultados bastante similares a los teóricos, con la diferencia de unos ciertos grados por encima del valor teórico calculado. Para intentar acercarnos un poco más al valor teórico, se afinó la malla del quemador, de forma que estuviese compuesta de más elementos, y así conseguir controlar y afinar el cálculo, con esto se obtuvo una recta muy similar a la de la malla inicial, pero más cercana al valor teórico, con lo que se consiguió satisfactoriamente lo que se buscaba.



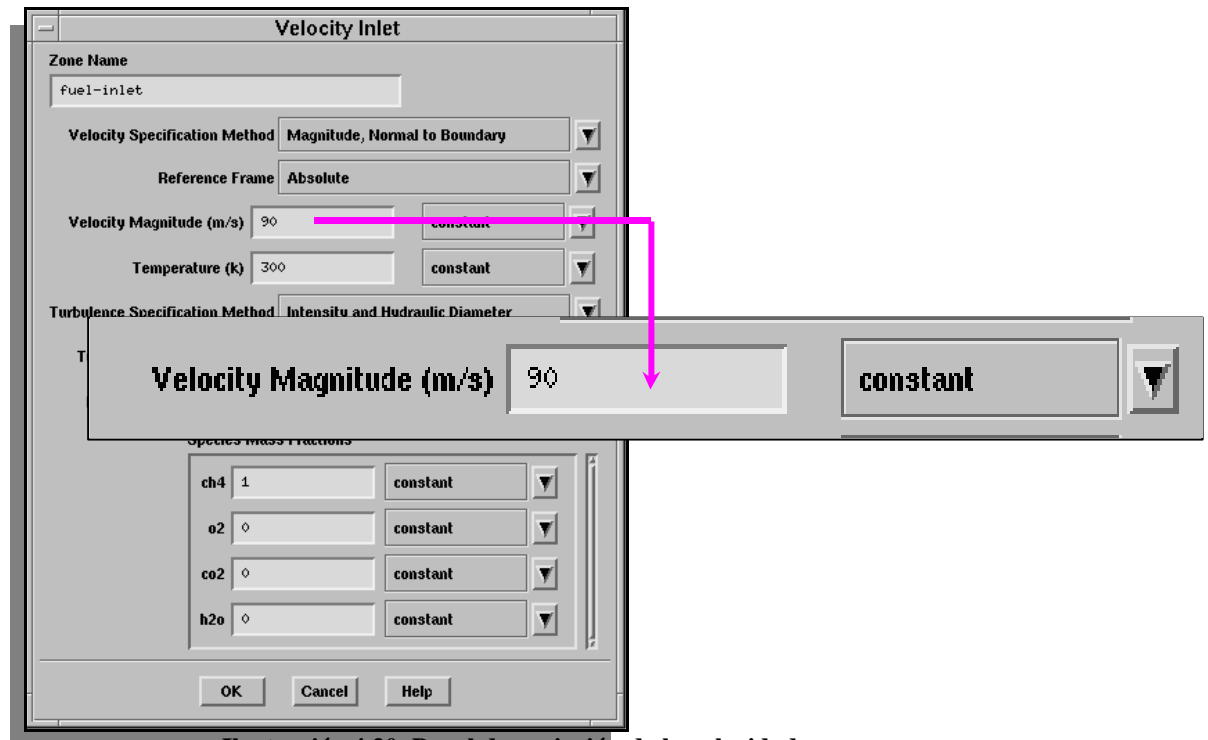


Ilustración 4.30. Panel de variación de la velocidad.

A continuación se muestran las mallas utilizadas, así como el detalle del inyector en cada una de ellas.

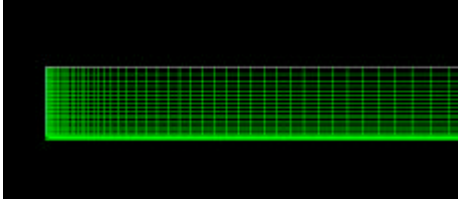
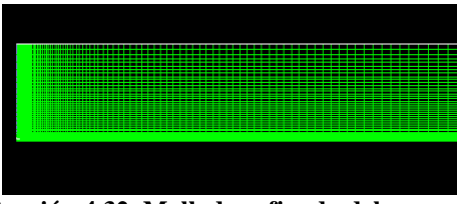
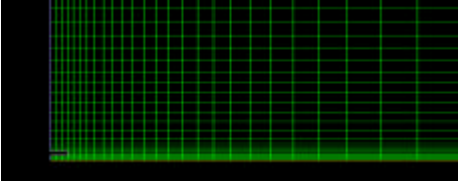
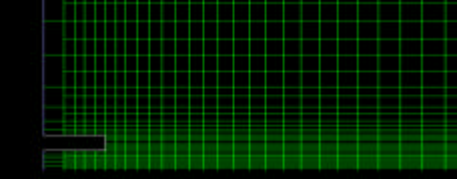
Mallado Inicial	Mallado Refinado
 <p data-bbox="252 1458 793 1485">Ilustración 4.31. Mallado inicial del quemador.</p>	 <p data-bbox="847 1458 1410 1485">Ilustración 4.32. Mallado refinado del quemador.</p>
 <p data-bbox="225 1715 815 1762">Ilustración 4.33. Detalle del inyector en malla inicial.</p>	 <p data-bbox="842 1704 1422 1762">Ilustración 4.34. Detalle inyector en malla refinada</p>

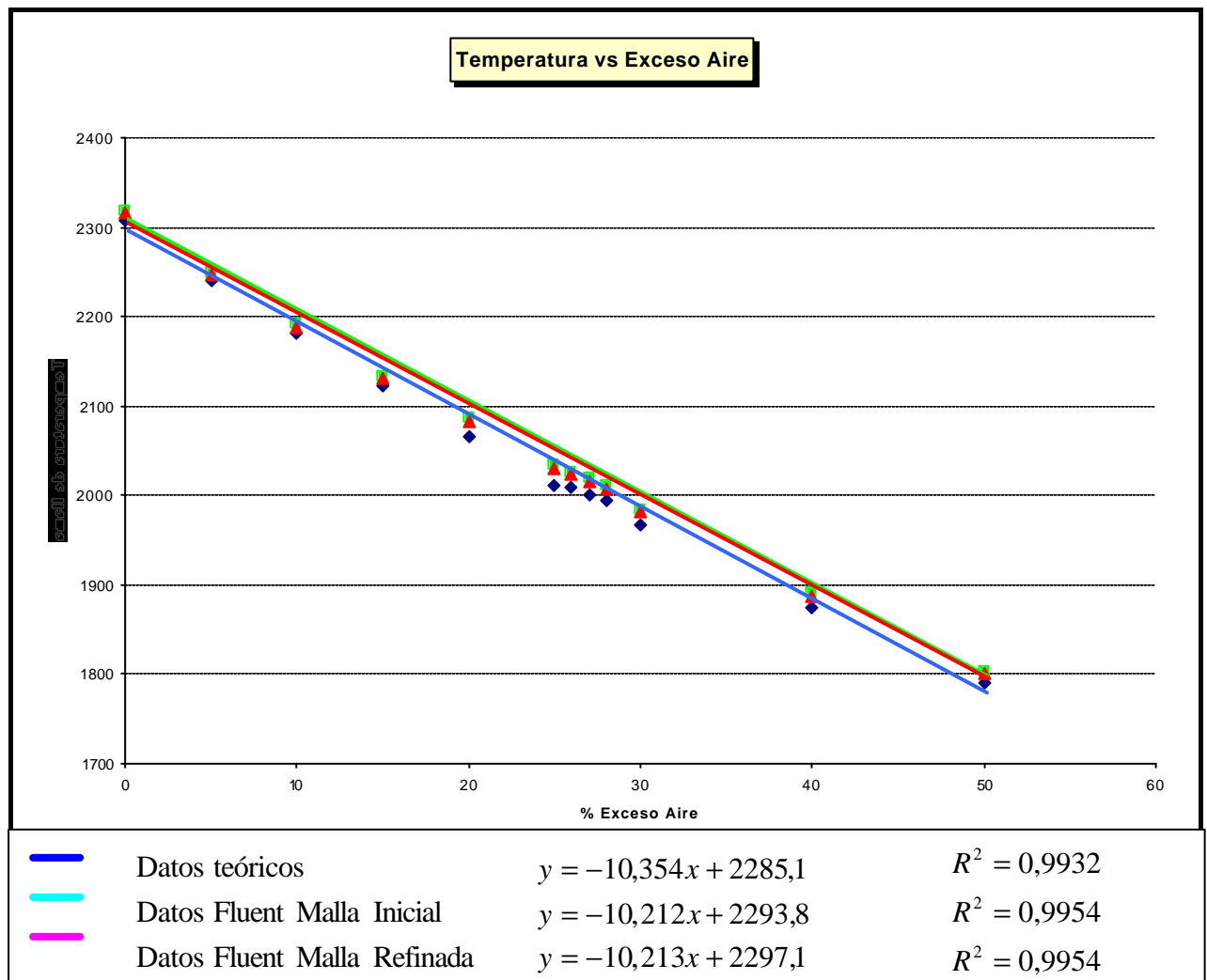
Tabla 4.16. Comparación entre malla inicial y malla refinada.

Los resultados para el cálculo de llama en función del porcentaje de exceso de oxígeno que se obtuvo con el programa Fluent, con ambos mallados fueron:

Exceso de Aire (%)	T ^a Combustión(°K) Malla Inicial	T ^a Combustión(°K) Malla Refinada
0	2318,357	2315,08
5	2249,29	2246
10	2191,77	2188,45
15	2134	2130,7
20	2085,75	2082,5
25	2033,274	2030
26	2026	2022,72
27	2019	2015,7
28	2010,094	2006,82
30	1984,76	1981,5
40	1890,55	1887,27
50	1803,576	1800,29

Tabla 4.17. Comparación entre temperaturas obtenidas según tipo de malla.

Para mostrar todos los resultados obtenidos, se han puesto en una gráfica de forma que se pueda mostrar la similitud entre los resultados obtenidos:



Tal y como nos muestra el gráfico las líneas de los tres casos son casi paralelas, con las líneas de los datos de Fluent ligeramente unos grados por encima del cálculo teórico, la línea en rojo, el mallado refinado, tal y como se puede ver, está más próximo al cálculo teórico, y la línea en azul celeste, perteneciente al mallado inicial, está justo por encima de ésta.

En todos ellos vemos, que partiendo del 0% en exceso de oxígeno, y hasta llegar a un 50% de exceso, se produce una disminución de la temperatura de llama de poco más de unos 500 °K.

También se pueden observar las rectas de regresión que se han obtenido y se puede comprobar que los resultados son muy próximos, sobretodo en los dos mallados diferentes, ya que únicamente varía el punto de corte, que está desplazado unos grados por debajo. Los R^2 también son bastante parecidos y correctos, ya que todos ellos contienen dos 9.

4.3.2. Formación NOx

En este capítulo, se estudiará lo comentado anteriormente, la formación del contaminante NOx que se produce durante la combustión de Gas Natural.

Primeramente, se inicia el capítulo con una introducción de los efectos del NOx y el porqué se pretende obtener una baja emisión de éste. También se indicarán los tres tipos de NOx distintos que existen y cómo se forman, según los diferentes combustibles que se utilicen.

Una vez se conoce esto, se estudian diversos parámetros que influyen en la formación de NOx, como puede ser diferentes geometrías (varios inyectores, diferente longitud del quemador), cantidad de oxígeno, temperatura de llama, nivel de turbulencia, velocidad de entrada de los gases....Se introducen estos parámetros y se estudia los puntos en los que se minimiza la cantidad de este contaminante.



Baja emisión de NOx

❑ Los inicios:

A principio de la década de los 80 la conciencia pública sobre las emisiones de las centrales energéticas estaba creciendo y empezó a introducirse la legislación.

La inquietud forzó los gobiernos en introducir nuevas y más estrictas medidas diseñadas para reducir las emisiones de las centrales energéticas.

❑ Introducción:

La Environmental Protection Agency (EPA) ha identificado el NOx como el precursor de la formación del ozono y es por esto que se hacen esfuerzos por reducir los niveles de emisión. La reducción del NOx en calderas industriales requieren de soluciones costosas e innovadoras. Esto implica modificaciones en el equipo de combustión o alteraciones en el mismo sitio de la caldera.

❑ La naturaleza de la niebla fotoquímica:

La polución fotoquímica del aire consiste en un complejo conjunto de gases de polución y aerosoles, algunos de los cuales son producidos fotoquímicamente.

Entre los componentes de estos gases se encuentran las especies oxidantes:

- Ozono (O_3)
- Dióxido de nitrógeno (NO_2)
- Peroxyacetyl Nitrate

El elemento más comúnmente encontrado en la atmósfera, de estos tres, es el peroxyacetyl nitrate (PAN).

Los tres componentes a menudo están juntos y son los llamados oxidantes fotoquímicos. [26]

❑ Elementos primarios y secundarios de la polución:

Los elementos primarios de polución son aquellos que son emitidos directamente a la atmósfera, y los secundarios son aquellos formados por reacciones fotoquímicas resultantes de la polución primaria que han sido emitidos a la atmósfera y han estado sometido a la radiación solar.

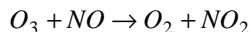
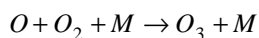
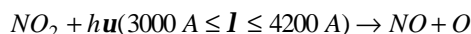
Hidrocarburos no quemados, NO, partículas y los óxidos o sulfuros son ejemplos de elementos de polución primaria. El Peroxycyl Nitrate y el ozono son de polución secundarios.

Algunos pero se pueden incluir en las dos categorías. El NO_2 que es emitido directamente por los gases de escape de los automóviles, se forma también en la atmósfera fotoquímica proveniente del NO. Los aldehídos, que son liberados también por los automóviles, son también formados en la oxidación fotoquímica de hidrocarbonatos.

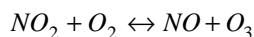


□ Los efectos del NOx:

Experimentalmente, se ha demostrado que en una cámara que contiene NO, con rastros de NO₂, si el aire es irradiado con luz ultravioletada, sucede la siguiente reacción:



El efecto de la radiación en el sistema inorgánico es el hecho de establecer un sistema dinámico de equilibrio:



No obstante, si el hidrocarbonato, particularmente oleofinas y bencenos, es añadido a la cámara el equilibrio representado en la última reacción es desequilibrado y suceden los siguientes hechos:

1. Los hidrocarburos son oxidados y desaparecen.
2. Se forman productos como los aldehídos, nitratos, PAN, etc...
3. NO es convertido a NO₂.
4. Cuando todo el NO es consumido, empieza a aparecer el ozono. Por otra banda, PAN y otros aldehídos son formados desde el inicio.

□ Que es el NOx y porque se hacen leyes para reducirlo.

Lo que se conoce por NOx está formado aproximadamente por un 97% de NO y por un 2% de NO₂ y el resto de N₂O. Mientras que el NO es un gas incoloro y sin olor, el dióxido de nitrógeno es un gas tono marrón con un olor que se puede detectar a bajas concentraciones. Cuando el nivel de dióxido en los gases de salida excede de 20 ppm, el humo en chimenea toma un color marrón o anaranjado.

En la atmósfera, el NO se oxida rápidamente en dióxido de nitrógeno, por lo que el NO atmosférico normal está compuesto básicamente de dióxido de nitrógeno y óxido de de nitrógeno. Sólo el 10% del NOx proviene de actividades humanas y sólo el 50% proviene de fuentes estacionarias como calderas. No obstante, el NOx producido por el hombre tiende a estar concentrado en zonas pobladas y de aquí los esfuerzos por reducirlo. [27]

El dióxido de nitrógeno es el precursor de la formación del ozono, que es el mayor componente conocido de la polución del aire en lo que concierne a la salud de los humanos. Las emisiones de dióxidos son también culpadas de provocar lluvia ácida, lo que contribuye a las acidificaciones de los lagos, degradación de los bosques y sospechosos de dañar a la salud. Por otra banda, las emisiones de N₂O son acusadas de contribuir a la reducción de la capa de ozono y de actuar como efecto invernadero por absorción de los rayos infrarrojos reflejados desde la superficie de la Tierra.



Proceso formación del NOx y tipos que existen:

Durante la combustión el NOx proviene de tres fuentes principalmente:

1. NOx térmico de la disociación y reacción del nitrógeno atmosférico.
2. NOx puntual formado en presencia de radicales CH.
3. NOx para el combustible o fuel NOx para el nitrógeno elemental que contienen algunos combustibles. [22]

El NOx térmico es el que se ve más afectado por la temperatura y el NOx del combustible por la disponibilidad del oxígeno en la zona de reacción.

La forma de reducir el NOx es simple. El quemador ha de estar adaptado, en términos de presencia de combustible y/o aire, para proporcionar una zona rica en combustible próxima a la zona de reacción primaria del quemador, esto reducirá los picos de temperatura y limitará el oxígeno en la zona de reacción primaria. Para la introducción de un gas inerte o recirculación de gases de escape, será igual.

Lamentablemente, mientras que lo anterior es cierto, las técnicas de modificación, que son beneficiosas en lo que representa la generación de NOx, normalmente tienen un efecto adverso en las partículas de los gases de escape y en los niveles de NO.

La eficiencia mejorada de la atomización del fuel-oil aumenta por si misma la producción de NOx. No obstante, esta medida permite reducir la zona estequiométrica primaria mientras que mantiene un nivel aceptable de partículas. El efecto limpio significa que una eficiencia alta en el atomizador es beneficiosa para el objetivo de reducir las emisiones de NOx al mismo tiempo que mantendrá una eficiencia alta.

➤ NOx térmico:

El NOx térmico es el que resulta de la disociación del nitrógeno atmosférico en zonas de alta temperatura de llama. Cuando el nitrógeno molecular es expuesto a alta temperatura, las moléculas de N_2 se descomponen en radicales N+ altamente reactivos, que reaccionan con el oxígeno para formar NO y NO_2 . Siguiendo con el mecanismo descrito por Zeldovich, el rango de formación y el punto de equilibrio del NOx térmico depende altamente del pico de la temperatura de la llama, y en menor grado de las concentraciones de N_2 y O_2 .

Consecuentemente, todos aquellos factores que incrementen la temperatura de llama, tales como el uso de aire caliente en la combustión y grandes cantidades de refractario, tienen tendencia a incrementar la formación del NOx térmico.

Los quemadores de bajo NOx y las técnicas de reducción reducen el pico de temperatura de la llama y el tiempo de exposición a esta temperatura, como también reducen el nivel de oxígeno dentro de la zona de pico de temperatura.



➤ **NOx puntual:**

La formación de NOx en la llama frecuentemente excede la predicción del modelo Zeldovich.

Esta formación adicional y rápida de NOx se ha llamado NOx puntual. Se forma en las primeras etapas de la llama de los hidrocarburos en presencia de radicales de hidrocarburos.

Se ha visto que el NOx puntual se minimiza con llamas pobres en combustible y se maximiza con llamas ricas.

➤ **NOx del Combustible o Fuel NOx:**

Se pueden formar grandes cantidades de NOx a causa de los combustibles que contengan átomos de nitrógeno ligados directamente a moléculas de hidrocarburos que forman parte del combustible. Ya que el oxígeno y el hidrógeno se oxidan durante la combustión, todos los átomos de nitrógeno se liberan en átomos inestables. Una fracción del total de átomos del nitrógeno del fuel se convierte normalmente en NOx y el resto se recombina en nitrógeno molecular. Si bien el porcentaje de conversión en NOx del nitrógeno del fuel decrece cuando el contenido en nitrógeno crece, la contribución relativa del nitrógeno del fuel en el total de emisiones de NOx puede ser significativa en fuels de alto contenido en nitrógeno.

Si un combustible gaseoso tal como el gas natural contiene N_2 , éste actúa como nitrógeno atmosférico y forma solamente NOx térmico. Por otro lado, los gases que contienen amoníaco NH_3 formarán fuel NOx. El nitrógeno también se encuentra en calderas de moléculas largas de los fueloils.

Niveles típicos de nitrógeno en los fueloils pueden variar desde 0,015% a 0,05% en peso de fuels ligeros (gasoil), a valores de 0,25% a 0,5% o mayores por fuel pesado. Los niveles de emisiones de fuel NOx en la combustión citados anteriormente pueden variar desde rangos bajos para los combustibles ligeros, o más elevados para los pesados. De forma muy clara un fuel pesado es un problema en la formación de NOx.

Añadido a todo esto, para que sea más complejo, la conversión del nitrógeno del fuel NOx decrece un poco cuando se incrementa la temperatura del aire de combustión, mientras que el NOx térmico se incrementa drásticamente.

Un método común para reducir el fuel NOx es quemar estos combustibles a alta temperatura, zonas primarias ricas en combustible que limitan la cantidad de oxígeno disponible y promueven la conversión del nitrógeno ligado al combustible en nitrógeno molecular. El aire de combustión se añade lentamente aguas debajo de la zona primaria para completar la combustión.



Consideraciones en la combustión de gas natural

En la combustión del gas natural, no se forma fuel NO_x , ya que no hay nitrógeno químicamente ligado, siendo el NO_x térmico la fuente de NO_x . Dado que las líneas de base en la formación de NO_x en la combustión de gas se forman vía reacciones térmicas, la técnica de control se centra normalmente en reducir el NO_x térmico, incluso a expensas de generar algo de NO_x puntual. En general, los quemadores de bajo NO_x con éxito deberán dirigirse a todos los métodos de reducción llamados como mecanismos de formación, es decir:

1. Reducir las zonas de alta temperatura.
2. Reducir el tiempo de residencia en las zonas de alta temperatura.
3. Evitar atmósferas oxidantes (pobres en combustible).
4. Evitar zonas ricas en combustible para la reducción del NO_x puntual (para cuando los niveles de NO_x requeridos sean extremadamente bajos).

Hay una aparente contradicción entre los puntos 3 y 4. Esto indica que no existen limitaciones en el control de NO_x solamente por estequiometría de la combustión.

Esto se debe a que únicamente con procesos externos convencionales (por ejemplo, formando intencionadamente regiones alternativas de zonas ricas/pobres en combustible) no es suficientemente efectivo para llegar a reducciones de NO_x térmico significativas.

Caso estudiado:

En el caso estudiado se trata de una mezcla de aire-metano, es decir, gas natural, con lo que únicamente se tendrá formación de NO_x térmico y NO_x puntual.

Posteriormente, se realizará un cálculo con fuel-oil, para realizar la comprobación de resultados con la utilización de diferentes combustibles, con lo que en este caso, se tendrá NO_x térmico y Fuel NO_x .



A.- Influencia de la geometría del quemador en la cantidad de NO_x formados

El estudio de la formación de NO_x se realizó sobre un quemador de longitud 1,8m por 0,225 m de diámetro ($L/D = 8$). En este quemador original tan sólo se podía encontrar un único inyector de metano. La simulación con Fluent para este caso dió como fruto el siguiente gráfico:

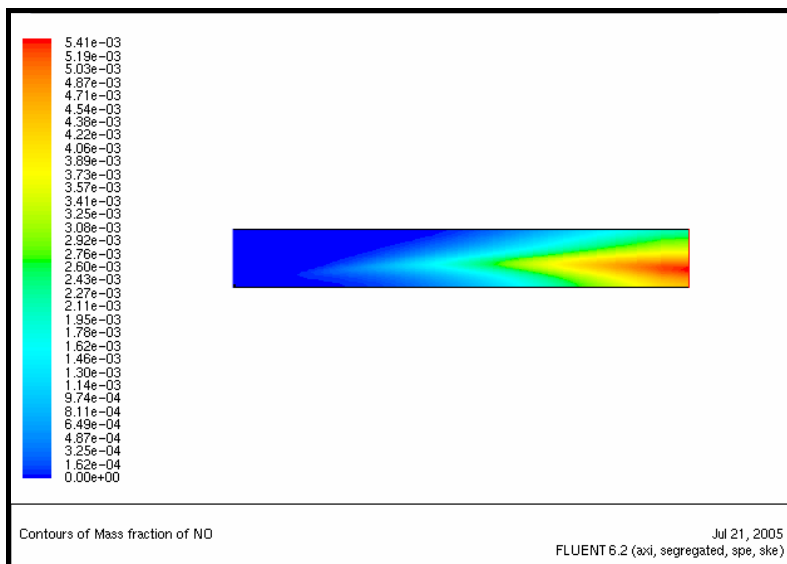


Ilustración 4.35a. Formación de NO_x con un inyector.

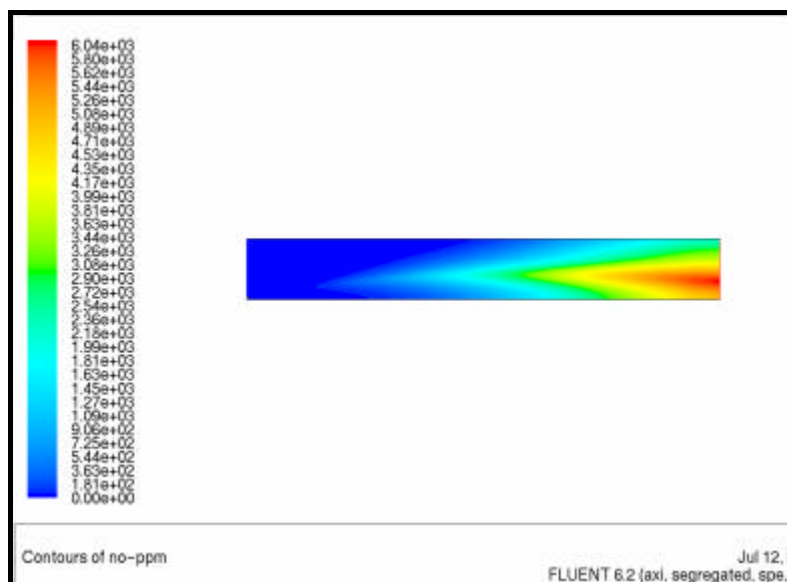


Ilustración 4.35b. Formación de NO_x en ppm con un inyector.

En la Ilustración 4.35a se puede apreciar como la producción de NO_x es bastante elevada y como se concentra en la salida del quemador. En la entrada, la producción es prácticamente inexistente y ésta empieza a ser apreciable, una vez se ha pasado la

mitad de la longitud de éste. A partir de este punto, la producción de NOx es mayor y se concentra en el eje de simetría.

Para observar la evolución punto a punto a medida que la combustión avanza en el quemador se mostrará el gráfico, donde en el eje de coordenadas se encuentra la posición relativa en el quemador, y en el eje de las y se muestra la concentración en ppm de los óxidos de nitrógeno formados. En los diferentes colores se muestra las zonas críticas de estudio. En amarillo, la salida del quemador (situada a la longitud de 1,8m). En rosa se muestra la zona de la pared exterior del quemador, y en azul se estudia toda la zona interior del quemador, punto a punto desde la longitud inicial hasta los 1,8 m, mostrando de forma clara la evolución que sufren la formación de NOx en este quemador.

El resto de zonas particulares como el aire o el metano de entrada, así como el inyector o el eje de simetría no se observan, ya que sus valores son insignificantes con respecto a estos otros, que por lo tanto serán los que nos interesen para todos los cálculos que se realizarán con diferentes variables. Todos estos diferentes estudios se observarán en las páginas siguientes.

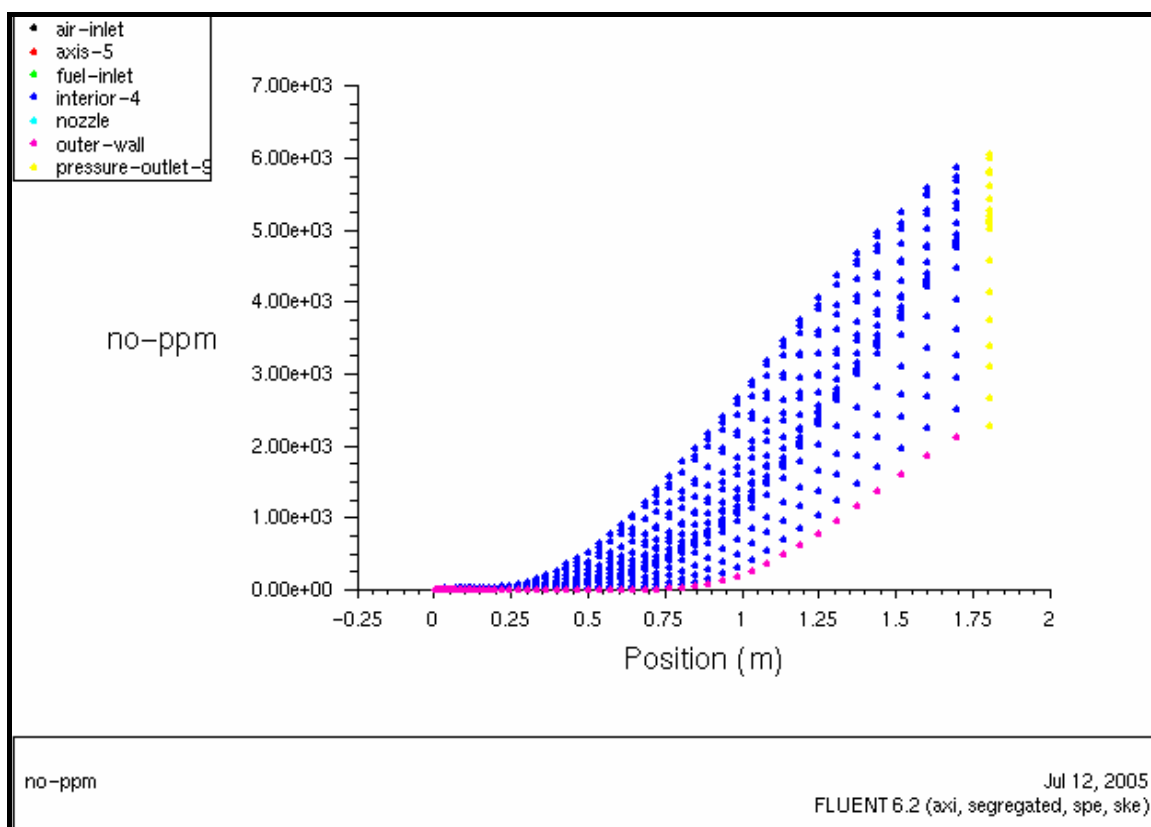


Ilustración 4.36. Evolución formación NOx según longitud.

Para comprobar si existe relación entre la geometría del quemador sobre los ppm de NOx se realizaron dos pruebas distintas:

4. Simulación de una combustión de Gas Natural



i) Aumentar el número de inyectores que introducen el metano.

En este caso se realizó un estudio con uno, dos y tres inyectores en medio plano de simetría. Como se puede observar la geometría y el mallado es exactamente igual, únicamente se diferencia en el número de inyectores presente, que se pueden observar a la entrada. En la figura superior muestra los dos inyectores, mientras que la figura inferior corresponde al caso de tres inyectores en medio plano de simetría.

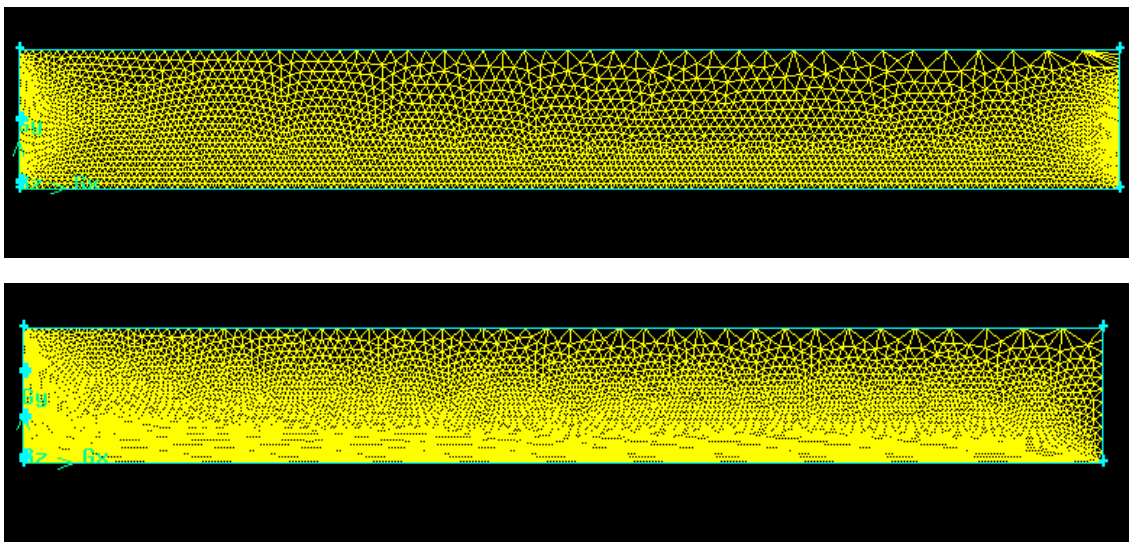


Ilustración 4.37. Geometría y mallado con Gambit de los casos con 2 y 3 inyectores.

Los resultados obtenidos en este caso comparándolos con el caso inicial fueron:

NºInyectores	Puntual+Térmico (ppm)	Puntual (ppm)	Térmico (ppm)
1	3967,18203	3918,71948	182,987248
2	0,45203007	0,11061915	0,04409463
3	5,0622E-05	4,3942E-05	4,2411E-08

Tabla 4.17. Formación NOx frente número de inyectores.

Los gráficos obtenidos fueron:

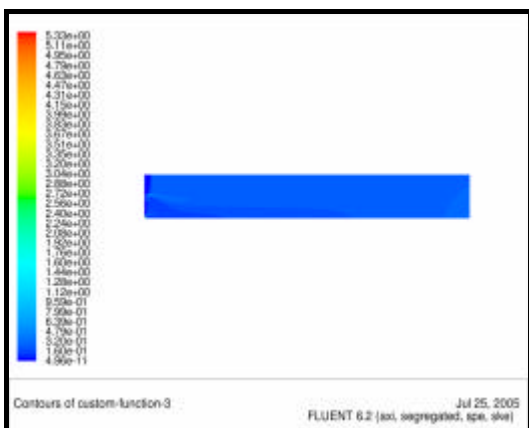


Ilustración 4.38. Formación de NOx con dos inyectores.

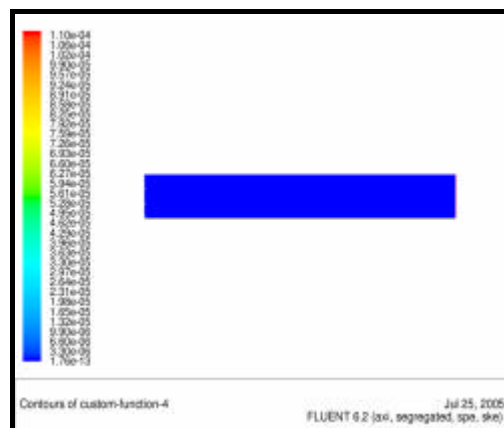


Ilustración 4.39. Formación de NOx con tres inyectores.

En la siguiente tabla se mostraran de forma más detallada los elementos que diferencian ambas geometrías, así como un contorno de la temperatura para mostrar como se produce las llamas en cada caso. Como se observa se ve de forma diferenciada la forma definida por los 2 o 3 inyectores.

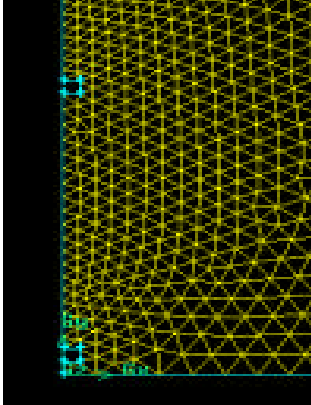
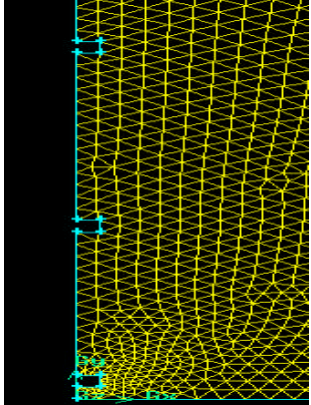
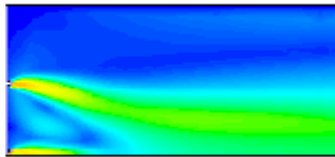
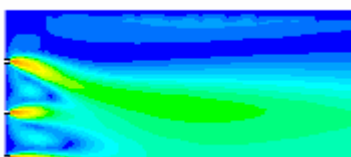
	2 Inyectores	3 Inyectores
Malla Geometría realizada en Gambit de los inyectores presentes en cada mallado realizado.		
Contorno Temperatura Para observar claramente cómo se producen las llamas en cada inyector.		

Tabla 4.18. Características de los quemadores de 2 y 3 inyectores.

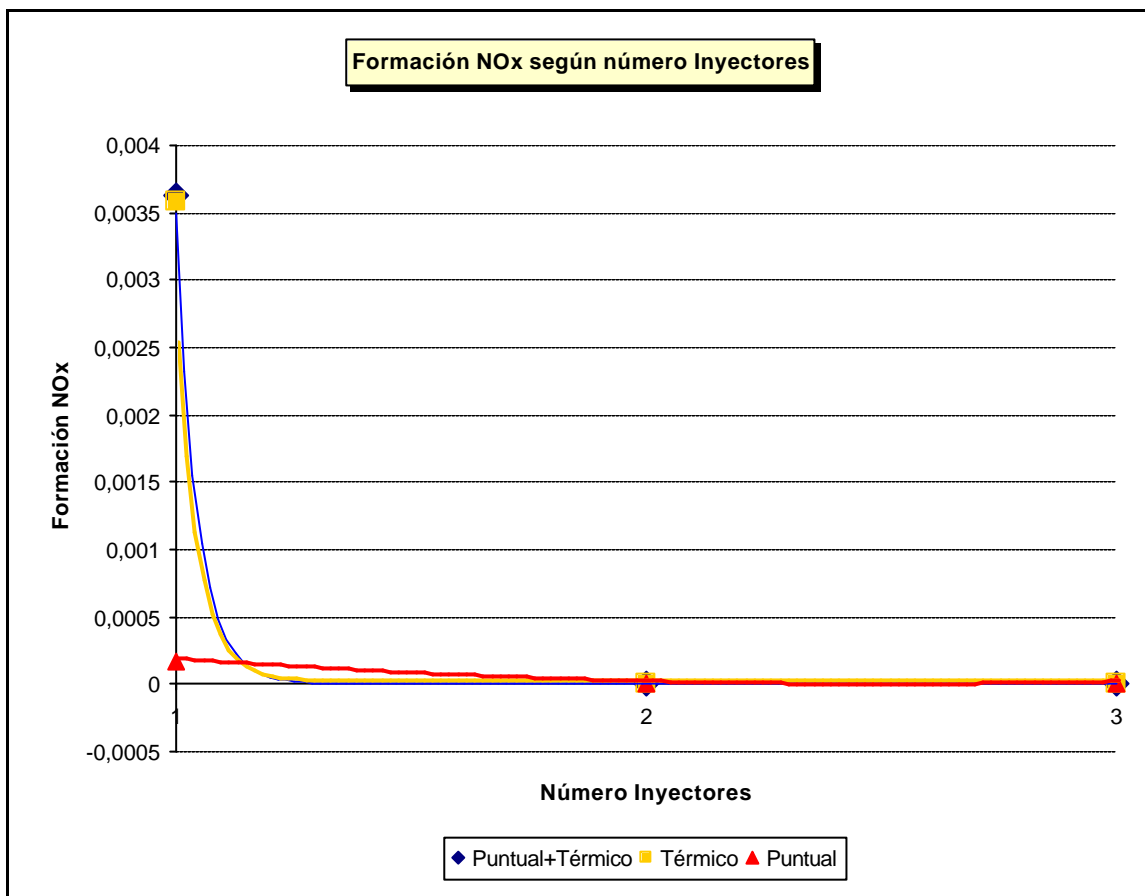
Como se puede apreciar en las ilustraciones, a medida que se aumentaba el número de inyectores que introducen metano, la cantidad de NO_x formado en el quemador se reduce. De hecho, ya con dos inyectores, en medio plano de simetría, el NO_x formado queda reducido considerablemente.

También adjuntaremos las temperaturas obtenidas en estas condiciones, y que como se ve son mucho menores que con las que se trabajaba en el caso original, ayudando a que haya menor fracción de NO_x.

Nº Quemadores	Temperatura Salida (°K)	Temperatura Máxima (°K)
1	734,55	1528
2	1828,956	2114
3	611,70	1633,42

Tabla 4.19. Temperaturas obtenidas en función número de quemadores

En el siguiente gráfico podemos observar esta conclusión:



Gráfica 4.5. Tendencia del NOx según el número de inyectores.

Como ya se esperaba con los gráficos de Fluent, vemos que a medida que el número de inyectores aumenta, la cantidad de NOx producida disminuye muy considerablemente. Esto se puede comprobar siguiendo las líneas de tendencia que aparecen al estudiar los datos de Fluent en una gráfica. Las líneas de tendencia no son del mismo tipo. En el caso de los datos sobre puntual + térmico y el NOx térmico se sigue una línea de tendencia de tipo potencial, en cuanto a la serie de datos sobre el NOx puntual se sigue una línea de tendencia polinómica.

En todos los casos, al pasar de uno a dos inyectores el orden de magnitud de la producción del gas se reduce hasta en 4 órdenes de magnitud. Es decir, con dos o más inyectores, según lo obtenido con Fluent, la producción de NOx es prácticamente nula.



ii) **Variar la relación L/D, donde L es la longitud y D el diámetro del quemador.**

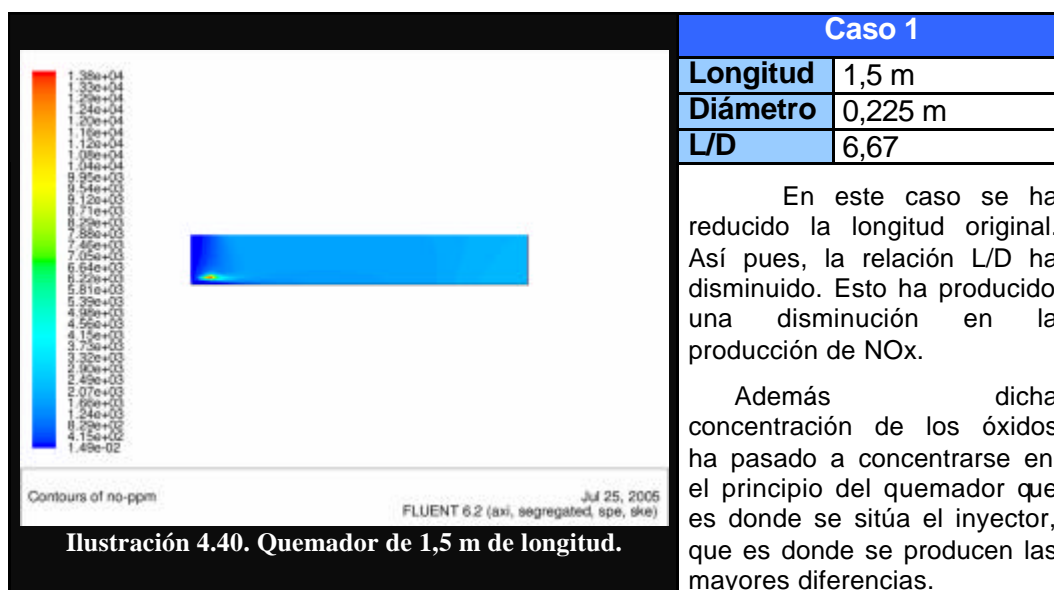
Para realizar este estudio se realizará las diversas geometrías, iguales a las del caso original y variando en cada una de ellas la longitud del quemador, para conseguir así relaciones L/D diferentes. Se estudiará el primer caso de longitud menor a la original y otros dos casos de longitud superior, llegando hasta una longitud que doblaba la longitud del quemador original.

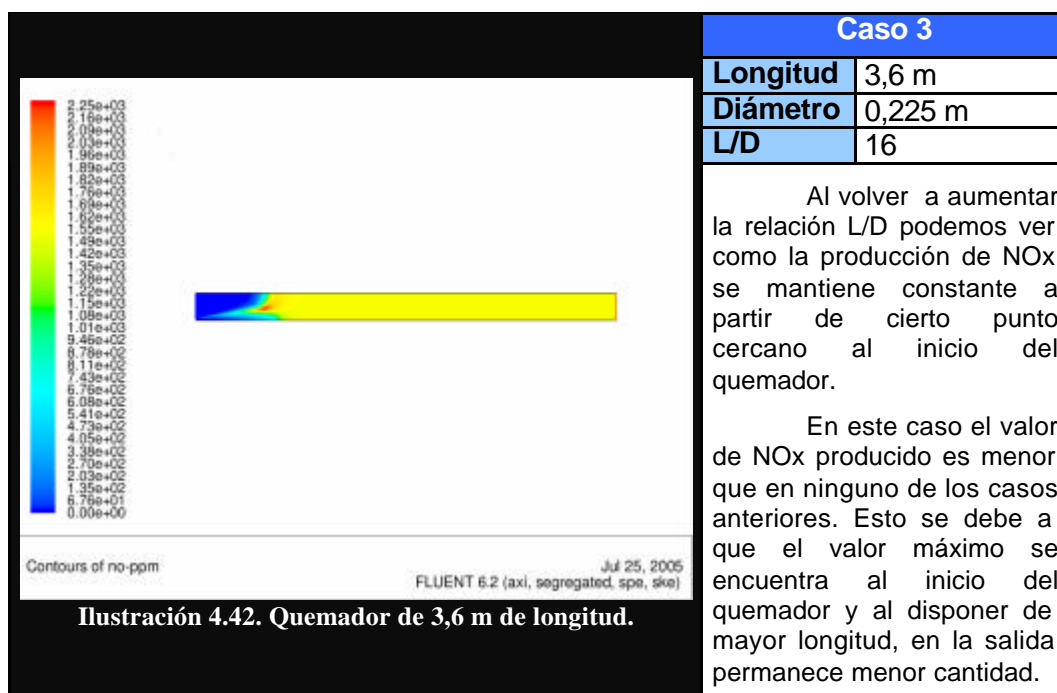
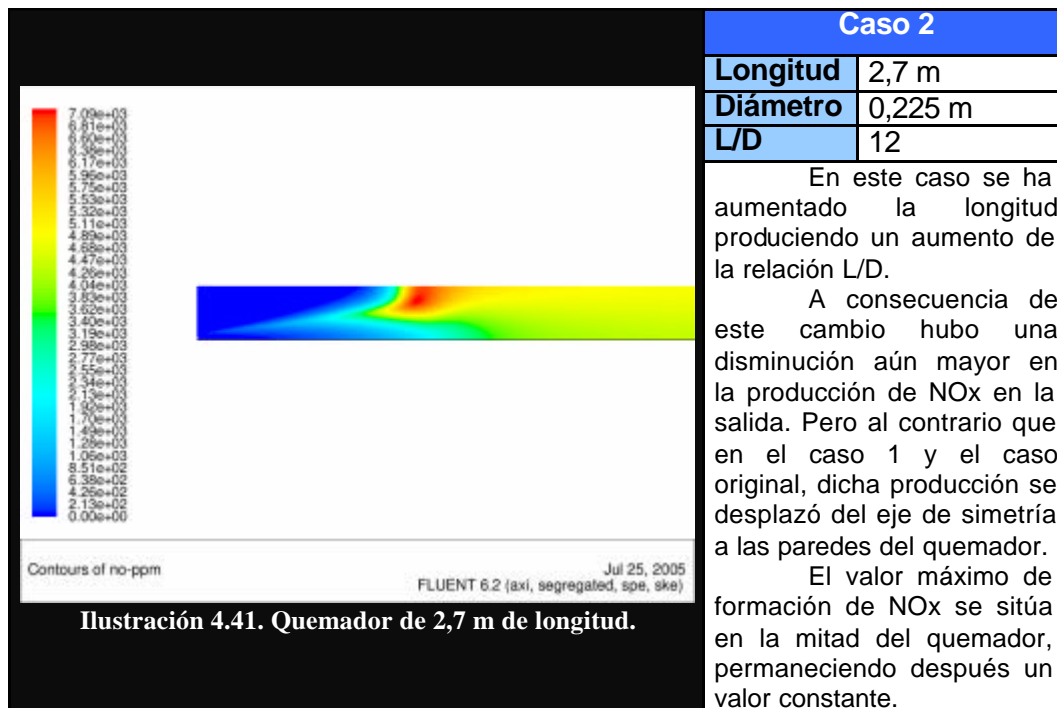
Los valores obtenidos fueron:

Longitud (m)	Puntual+Térmico (ppm)	Puntual (ppm)	Térmico (ppm)	Máximo (ppm)	Entrada Fuel (ppm)
1,5	3497,838752	3432,254275	131,168953	5683,98797	8,1325E-12
1,8	3967,860834	3913,207104	182,987248	5924,46439	9,1928E-12
2,7	3060,608908	2940,370701	87,4459688	6339,83274	3,2355E-12
3,6	2623,379064	2492,210111	546,537305	6667,75512	2,5031E-13

Tabla 4.20. Formación NOx según Longitud Quemador.

A continuación se mostrará de forma más detallada los casos estudiados resaltando los valores más destacables de cada uno, así como comparándolos con el caso original. El caso 1 corresponde a una longitud menor a la inicial, y los casos 2 y 3 corresponden a longitudes superiores:





Tal y como se ha podido observar en todos los casos estudiados se ha obtenido menor fracción másica de NOx a la salida del quemador, y en todos ellos varía el lugar donde se concentra la mayor concentración de éstos.

A pesar de esto si miramos la producción máxima de NOx el caso que presenta mayor cantidad de NOx, es a la mayor longitud. Todo esto se debe a las temperaturas

que se adquieren tanto en la salida como la temperatura máxima que llega a producirse en algún punto del quemador.

Longitud (m)	Temperatura Salida (°K)	Temperatura Máxima (°K)
1,5	1726,769	2110
1,8	1828,956	2114
2,7	1630	2130
3,6	1476,10	2164

Tabla 4.21. Temperaturas obtenidas en función variación de la longitud.

Como se observa la temperatura de salida es menor en todos los casos, destacando una mayor reducción en el caso 3. Por otro lado, la temperatura máxima alcanzada en el interior del quemador se rige por otro criterio, ya que en este caso a longitudes superiores se llega a temperaturas máximas más elevadas, y consecuentemente una mayor concentración de NO_x, aunque en algunos casos estas diferencias no son muy significativas.

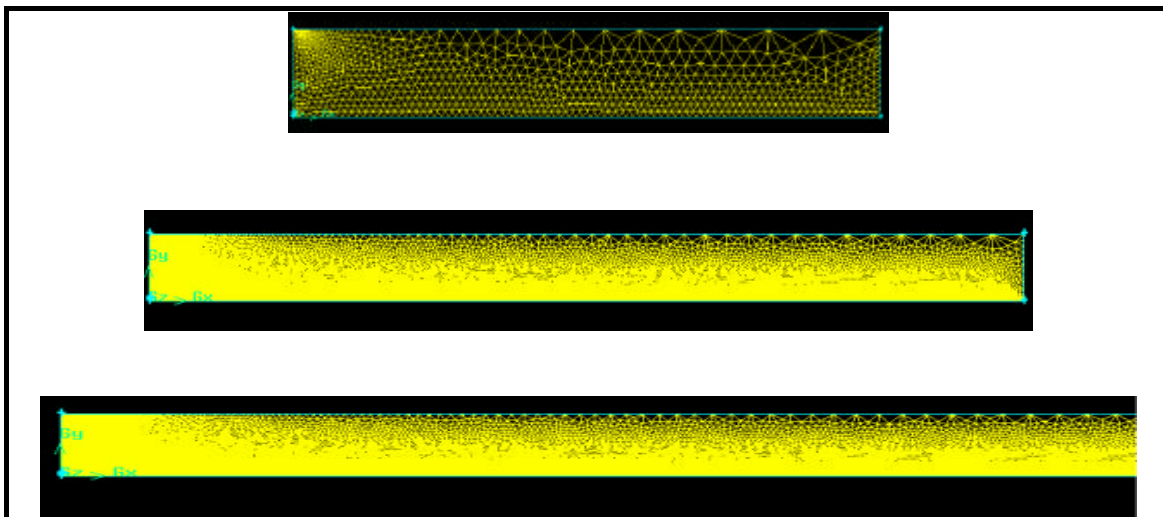


Ilustración 4.43. Mallado de los quemadores de diferente longitud.

En lo que respecta en las zonas donde se concentra la mayor parte se tiene: a la mayor longitud el valor máximo se obtiene aproximadamente en el primer tercio del quemador y posteriormente la cantidad de NO_x se mantiene constante. En el caso de la longitud de 2,7 m, como se ha dicho, la zona de mayor concentración se encuentra aproximadamente en la mitad del quemador, y después también se mantiene bastante constante, aunque difiere en algunos valores de los cercanos al eje de simetría. La longitud menor a la original presenta un caso diferente, la producción mayor de NO_x tiene lugar en la zona próxima al inyector, de aquí que aunque el valor a la salida ha reducido los óxidos de nitrógeno formados respecto a la longitud de 1,8 m, el valor máximo (que se encontrará en la zona próxima al inyector) que se obtiene es bastante similar al valor máximo que se obtenía con el quemador original de 1,8 m.

B.- Influencia en la formación de NOx del tipo de llama: premezcla o difusión

Para poder realizar la comparación con el modelo estudiado (llama de difusión) era necesario tener un quemador de premezcla, así que éste se dibujó con Gambit tal y como los quemadores de Premezcla encontrados en la bibliografía, ya que disponen de unas características diferentes de las que presentan los quemadores de difusión, ya que partiendo del original no se le podían aplicar las características de llama de premezcla. Para poder realizar la comparación correctamente se utilizan las mismas medidas de geometría del quemador original.

Se trata de un quemador de premezcla con ensanchamiento brusco en la descarga que favorece la estabilización.

Las características de funcionamiento son:

Su flexibilidad es limitada:

- En potencia, por los límites de estabilidad. Raramente se consigue en equipos industriales flexibilidades superiores a $\frac{1}{4}$.
- En tasa de aireación, por razón de los límites de inflamabilidad.
- El retorno de llama se evita, reduciendo los orificios de alimentación.
- La recuperación también se dificulta en estos tipos por el riesgo de calentar mezclas.

Pero se siguen utilizando por su:

- Elevada intensidad de combustión y temperaturas altas de llama.
- Elevada potencia específica del frente de llama.

Injector: se produce la entrada y la mezcla de los componentes: aire-metano. Se simula la zona anterior al quemador, que se tratará de donde se produce la mezcla, de aquí se obtendrá unas condiciones de contorno en la salida que serán las que se utilizarán como condiciones de entrada de operación en el quemador, donde ya se dispone de la mezcla de los componentes que se ha producido. Es decir las condiciones obtenidas como Pressure Outlet en la geometría 1 (inyector) se convierten en las condiciones que imponemos como Velocity Inlet en la simulación con Fluent de la geometría 2 (quemador). Esto se realiza gracias a la opción de Fluent de crear un Profile.



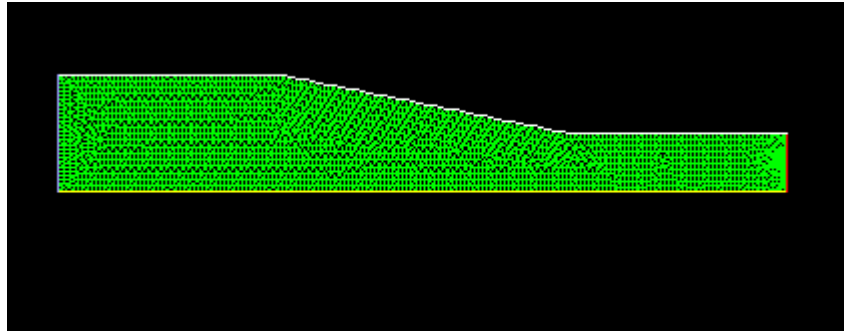


Ilustración 4.44. Inyector donde se produce mezcla aire-metano.

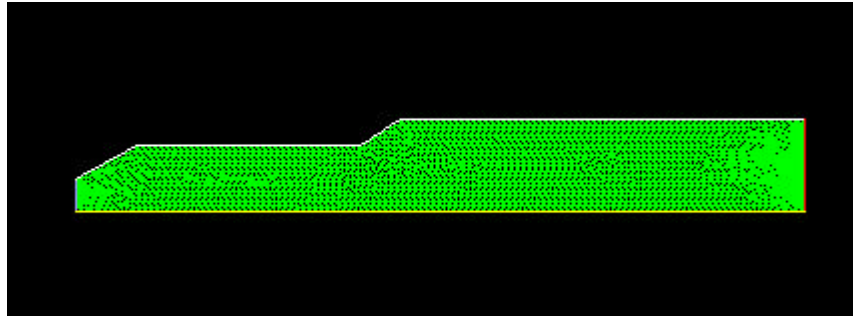


Ilustración 4.45. Quemador de premezcla.

Los resultados obtenidos han sido para el caso de estudio fueron:

Tipo LLama	Puntual+Térmica (ppm)	Puntual (ppm)	Térmica (ppm)	Máximo (ppm)
Difusión	3967,860834	3913,207104	182,987248	5924,46439
Premezcla	4992,21	3430,09	262,4	10684,55

Tabla 4.22. Formación NOx según tipo de llama

Tal y como se puede observar la formación de NOx se ve incrementada si utilizamos un llama de premezcla. Su valor aumenta cerca de 1000 ppm con respecto a una llama de difusión, que es el tipo de llama con el que se ha realizado todos los casos. También cabe destacar que el valor máximo que se obtiene a lo largo del quemador es mucho más elevado que con la llama de difusión.

C.- Quemar a velocidades diferentes del metano.

En el caso original la velocidad de entrada del metano era de 80 m/s. A dicha velocidad, la cantidad de gas NOx producida era de 3967 ppm.

La hipótesis era que al aumentar la velocidad de inyección del gas metano, la formación del gas contaminante se reduciría debido a que hay menor tiempo de contacto con el aire, cuya velocidad de entrada no varía.

A medida que se iban realizando las pruebas, se pudo comprobar que, efectivamente, la velocidad de NOx iba disminuyendo a medida que la velocidad del metano aumentaba. Pero también se pudo observar como la concentración de NOx disminuía también al disminuir la velocidad de entrada del gas natural.

A velocidades muy bajas de entrada del metano lo que tenemos es un gran exceso de oxígeno, con lo que se obtiene una dilución mayor que hace que los óxidos de nitrógeno formados sean menores.

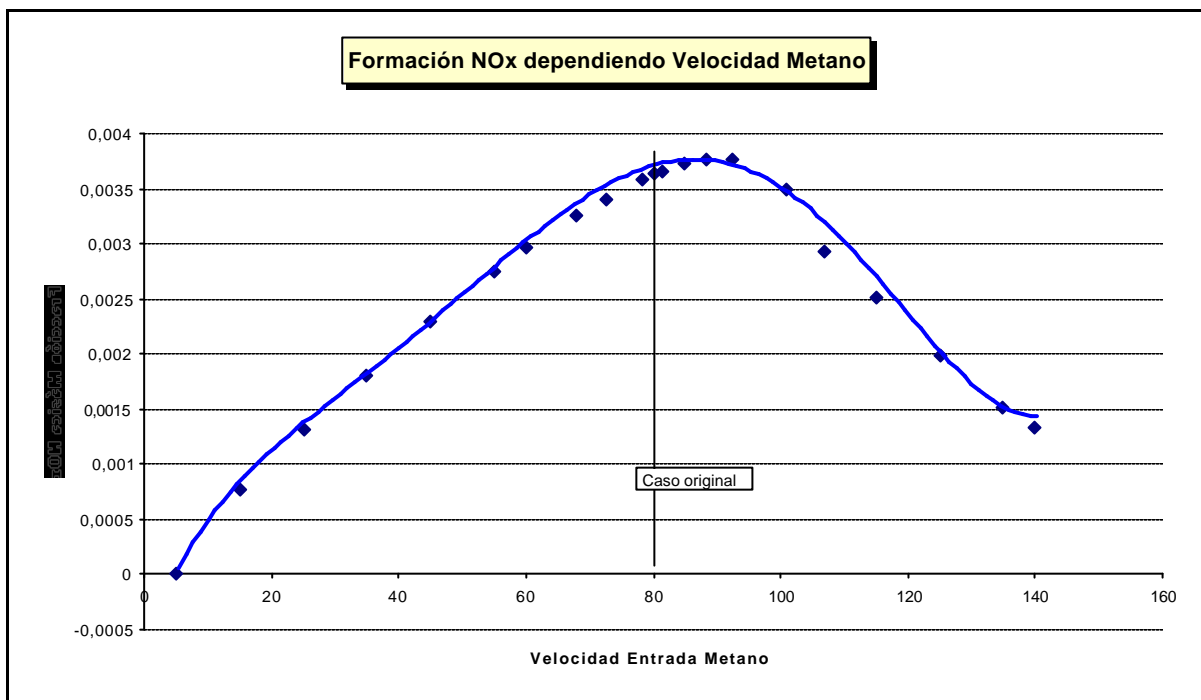
Velocidad Metano	Fracción Másica de NOx
140	0,00132381
135	0,001518433
125	0,0019947
115	0,002518
107	0,002937
101	0,003494
92,5	0,00375915
88,2	0,003759584
84,8	0,003725479
81,3	0,003658013
80	0,0036294
78,2	0,003583004
72,5	0,003409859
68	0,003259618
60	0,00296708
55	0,002750602
45	0,002287392
35	0,001803671
25	0,001313473
15	0,000769522
5	1,00E-05

Tabla 4.23. Formación Másica de NOx respecto a la velocidad de inyección de metano.



Algunos valores de éstos son casos extremos que difícilmente se podrán realizar en la realidad, ya que los valores de velocidad menor que encontramos en la tabla, de 5 a 15 m/s corresponden a un porcentaje de exceso superior al 200% de oxígeno, pero que gracias a una simulación podemos estudiar.

Y los valores de velocidad muy elevada tampoco son posibles ya que en este caso tenemos el contrario, no se dispone ni de la cantidad mínima necesaria para que la combustión sea completa.



Gráfica 4.6. Evolución de la formación de NOx respecto a la velocidad de entrada del metano.

En la gráfica 4.6, se representan los valores obtenidos en las diversas simulaciones variando la velocidad de entrada del metano, permaneciendo constante la velocidad de entrada del aire, que es mucho menor. El gráfico nos muestra lo anteriormente comentado, presenta una forma de campana, con ascensión hasta los valores máximos que se encuentran alrededor de los 100 m/s, y a partir de este valor se produce un descenso, hasta el valor máximo estudiado, de 140 m/s.

D.- Varios parámetros de estudio en la reducción de NOx en el quemador.

D.1. Reducir el pico de T en la zona de la llama.

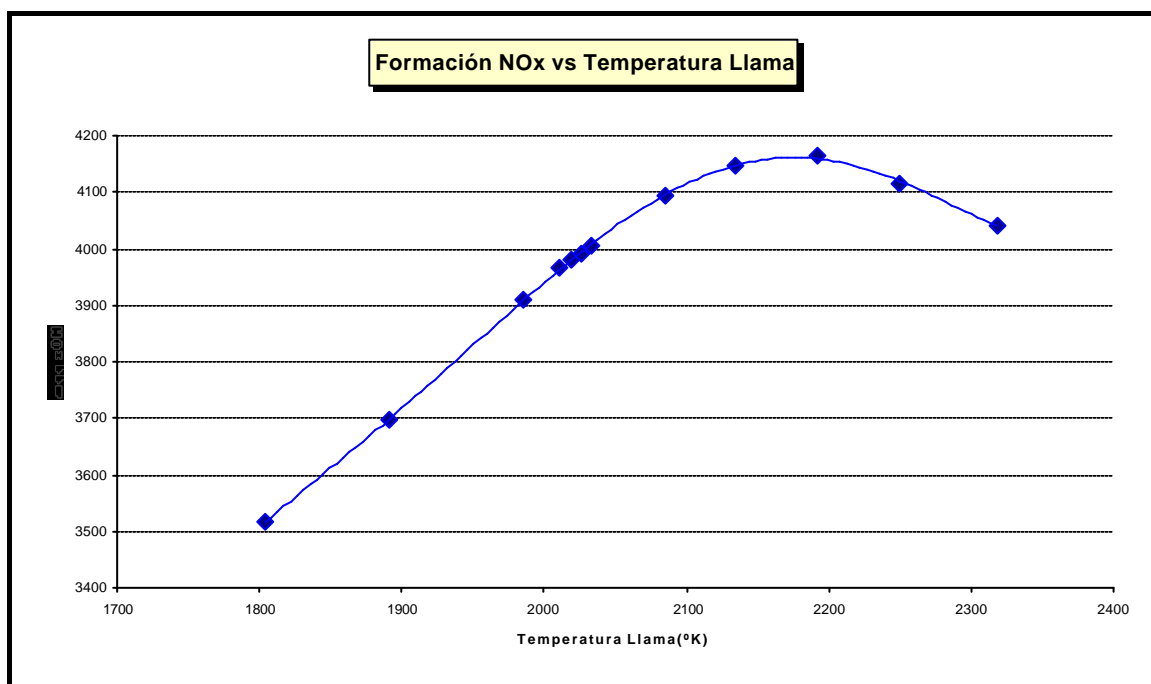
Los datos que se obtienen a los diferentes picos de temperatura de llama son:

TªLlama (°K)	Formación NOx (ppm)
2318,357	4040,16
2249,29	4116,014
2191,77	4165,63
2134	4146,734
2085,75	4093,821
2033,274	4004,269
2026	3992,04
2019	3980,11
2010,094	3967,205
1984,76	3908,736
1890,55	3695,76
1803,576	3515,669

Tabla 4.24. Datos de Temperatura Llama y su formación de NOx.

A temperaturas elevadas (>1900°K) tanto la termodinámica como la cinética favorecen la formación de NO. Por tanto, deberán evitarse los picos de temperatura. Existen dos maneras para obtener este resultado:

- Evitar las altas tasas de liberación de calor.
- Alcanzar altas tasas de remoción de calor.



Gráfica 4.7. Formación NOx según temperatura de llama.

Tal y como se muestra en el gráfico superior y como se observa en los datos numéricos de la tabla, a medida que se consigue reducir el pico de temperatura de llama que se produce a la salida del quemador, la cantidad de óxidos de nitrógeno se

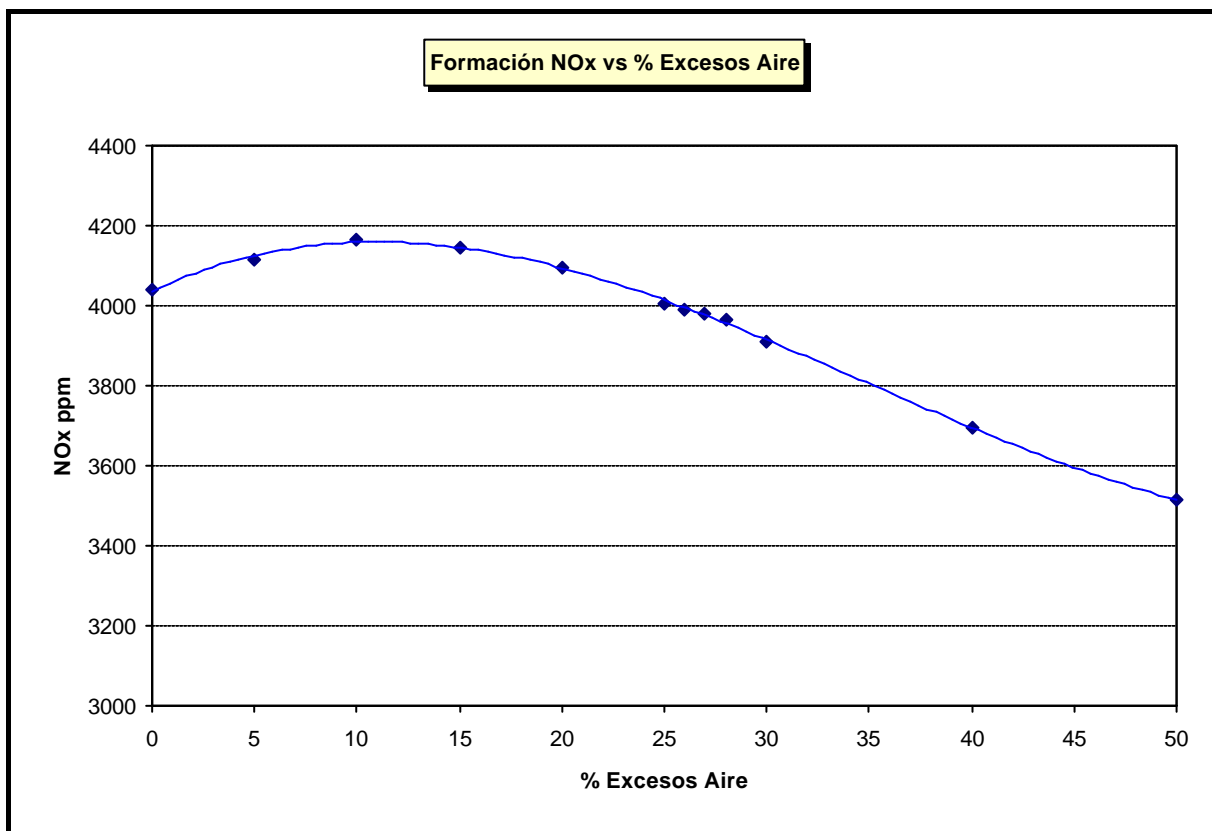


reduce considerablemente. Desde un valor máximo de 4165 ppm, a una temperatura de 2191°K, se llega a reducir hasta los 3515 ppm que son los que se obtienen a una temperatura de 1803°K.

Una vez se ha llegado a este valor máximo de NO_x formados, si seguimos aumentando aún más la temperatura, los óxidos de nitrógeno también se reducirán, aunque en menor importancia.

D.2. Aumentar el exceso de oxígeno.

Otro parámetro estrechamente ligado con la temperatura es el contenido de oxígeno de la mezcla. La relación entre el aire y el combustible determinan en gran parte la temperatura pico. Además, deberá estar presente un exceso de oxígeno a fin de que reaccione con el nitrógeno. A pesar de que la relación estequiométrica entre el aire y el combustible conduce esencialmente a la máxima temperatura de combustión posible la concentración máxima en equilibrio del NO_x ocurre a un por ciento de aire estequiométrico diferente del 100%. La presencia de un aumento en la concentración de oxígeno lleva a una producción mayor de NO en el equilibrio.



Gráfica 4.8. Formación NO_x según porcentaje de exceso de oxígeno.

La combustión constituye un enfoque para el control del NO_x cuando está cerca de los valores estequiométricos del aire. Esto es causa de problemas con los otros contaminantes del aire en los procesos de combustión.



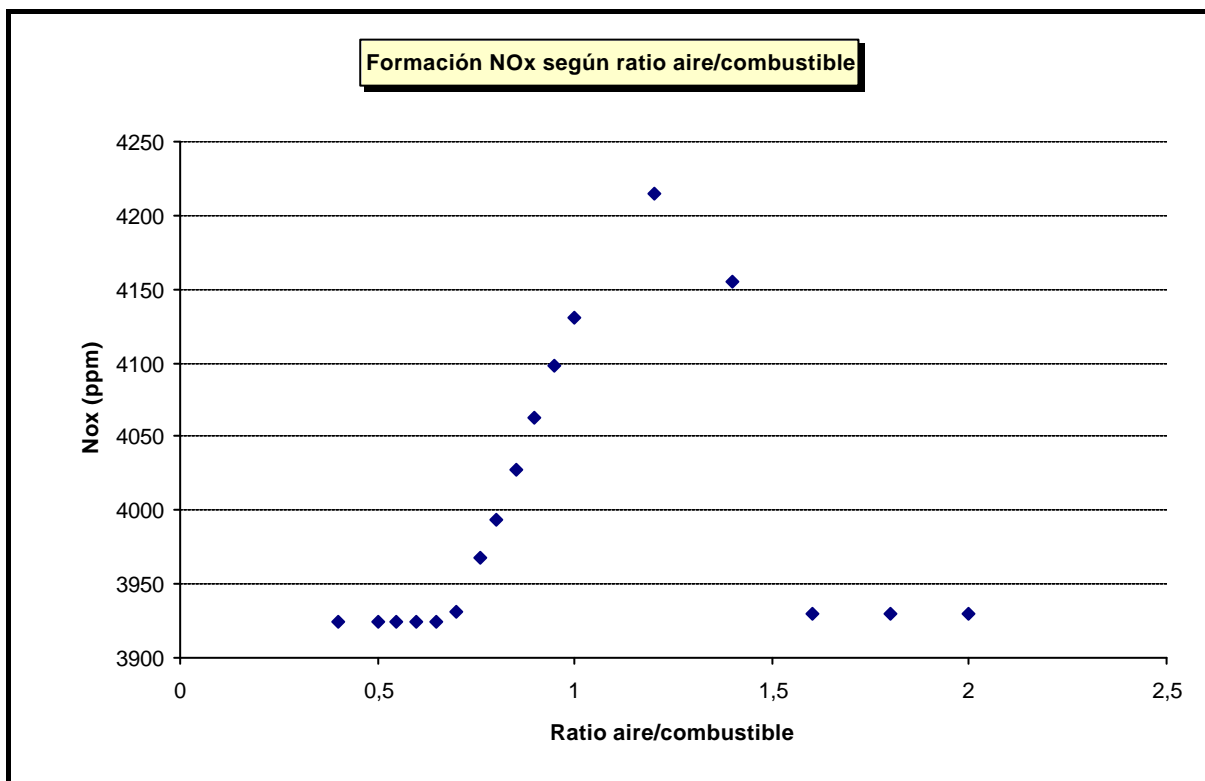
En las combustiones estequiométricas completas, los productos de la combustión son los de reacción completamente oxidados (CO_2 , H_2O , SO_2 ,...) y los inertes N_2 .

Cuando hay exceso de aire aparece además el O_2 , y la atmósfera se llama oxidante, si, además, existen CO y H_2 en proporciones tales que $\text{CO} + \text{H}_2 < 2 \text{O}_2$, la atmósfera se llama semioxidante; si la desigualdad anterior tiene el signo contrario, la atmósfera se llama semireductora. En el caso de que se trabaje con defecto de aire, no exista oxígeno, sino sólo CO_2 , H_2 y, eventualmente, inquemados, la atmósfera se llama reductora.

D.3. Combustión por etapas:

La combustión por etapas es un método efectivo que controla ambos NO_x , el térmico y el puntual. Aunque la combustión por etapas puede ser utilizada tanto en el aire como en el fuel, en muchas calderas package convencionales, su uso de etapas de fuel externas no es factible.

El concepto de aire externo por etapas está basado en la explicación del efecto de la formación de combustión con fuel rico/fuel pobre en la formación de NO_x .



Gráfica 4.9. Formación NO_x según ratio aire / combustible.

La formación de NO_x es una función del ratio aire / combustible y también una función del grado de mezcla de los reactantes. Con aire por etapas, se genera una alta temperatura, zona primaria rica en combustible con un tiempo de residencia bastante



largo, para minimizar la conversión del nitrógeno del fuel en nitrógeno molecular en atmósfera de bajo oxígeno. El aire secundario se añade posteriormente para completar la combustión.

Aunque el potencial de reducción del fuel NOx utilizando el aire por etapas puede conseguir el 55%, la magnitud que puede aplicarse en calderas industriales es limitada por la geometría del quemador. Varios suministradores de quemadores ha utilizado con éxito el aire por etapas en calderas package industriales y en grandes calderas con múltiples quemadores, utilizando puertas de NOx en la pared frontal o lateral.

El diseño de puertas de NOx en la pared frontal desvía una porción del aire de combustión desde el cajón de aire a puertas localizadas alrededor del difusor del quemador.

El aire por etapas se mezcla aguas debajo de la zona primaria de la llama y puede ser controlada por un registro. Una desventaja de este sistema es la dificultad en controlar la rapidez de la mezcla con los productos de combustión primarios. Una mezcla prematura supone un elevado NOx, mientras que una mezcla retardada resulta en longitudes de llama muy largas.

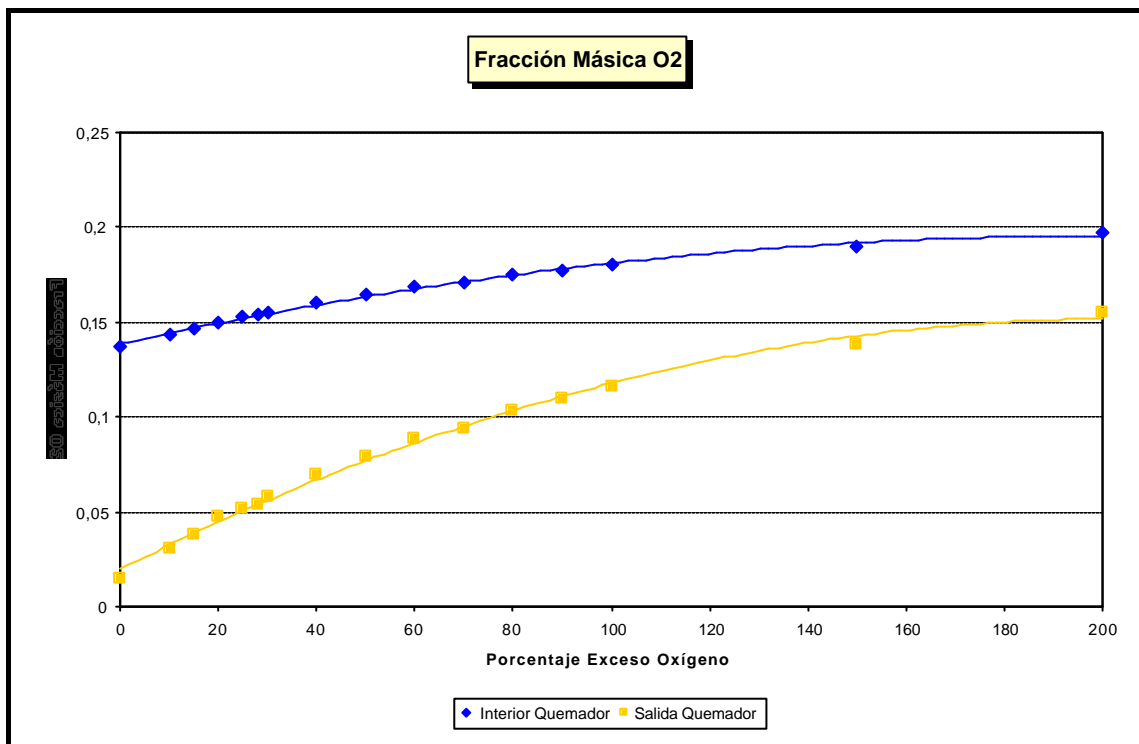
Comparativamente se puede tener llamas más cortas con la misma reducción de NOx con el uso de puertas laterales de NOx en lugar de frontales. En una caldera con multiquemador se pueden poner a ambos lados de las paredes de la caldera e incluso por encima del nivel superior del quemador. El uso de estas puertas de NOx ofrece la ventaja de controlar la mezcla del aire por etapas debido a la separación positiva entre la zona primaria y secundaria del aire y del hecho que el aire es inyectado en un ángulo recto respecto al cuerpo principal de la llama. Pero, por otro lado, las paredes de NOx laterales tienen la desventaja de incrementar los impactos de la llama y las emisiones de CO. También es una desventaja la necesidad de modificar los tubos de las paredes laterales para implantar las puertas de NOx.

Debido a las altas temperaturas en la zona primaria de combustión y el incremento de los radicales CH, el aire por etapas puede tener el efecto de incrementar ligeramente en muchos casos el NOx térmico y el NOx puntual.



D.4. Reducir el O₂ en la zona de la llama.

Para estudiar cómo afecta la cantidad de O₂ en la zona de la llama a la formación de los óxidos de nitrógeno, primero se mostrará la evolución de la fracción másica de O₂ en función del porcentaje de exceso de oxígeno que tengamos, para poderlo comparar con el caso original de un 28% de exceso. Este caso es como un estudio complementario del apartado con el %exceso de oxígeno, y se pretende mostrar la relación directa que tiene la formación de NO_x según la cantidad de oxígeno presente en la mezcla.

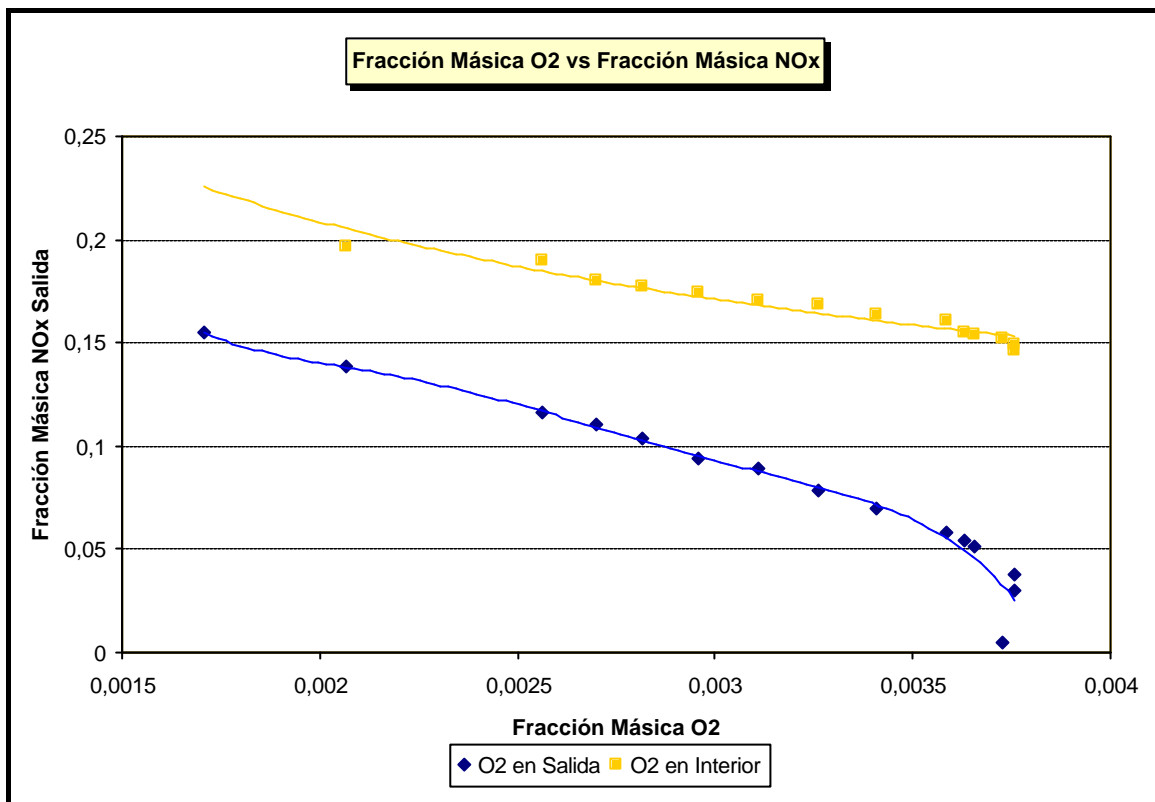


Gráfica 4.10. Fracción másica de O₂ en función del porcentaje de exceso de oxígeno.

Se han realizado las diferentes simulaciones y se toman los datos de la fracción másica de O₂ respecto al porcentaje de exceso de oxígeno que se tiene tanto en el interior del quemador, como la cantidad que hay en la salida del quemador. Como se observa las dos series siguen una evolución polinómica donde los valores menores que se obtienen que corresponden a la salida del quemador.

Como se observa la fracción en el interior siempre es mayor que a la salida, como era esperable ya que la reacción se produce con el oxígeno y tiene lugar a lo largo del quemador.

Una vez tenemos estos datos, lo que se estudiará es la formación másica de NO_x en función de la cantidad de O₂ que tengamos, y que ya se ha obtenido anteriormente:

Gráfica 4.11. Formación de NOx según cantidad de O₂.

%Exceso Oxígeno	Fracción Másica O ₂	Fracción Másica O ₂	Fracción Másica NOx
	Interior	Salida	Salida
0	0,1368256	0,0150175	0,0037501
10	0,143343	0,03008636	0,00375915
15	0,1467887	0,03809646	0,003759584
20	0,1496175	0,047079	0,003725479
25	0,1525366	0,05160089	0,003658013
28	0,153642	0,05420975	0,0036294
30	0,1551752	0,05792549	0,003583004
40	0,160485	0,06977418	0,003409859
50	0,164154	0,07885805	0,003259618
60	0,1684434	0,08872253	0,003110264
70	0,1708591	0,0938271	0,002958489
80	0,1748591	0,1035826	0,002817437
90	0,177631	0,1100078	0,00269816
100	0,1801333	0,1158071	0,002562333
150	0,1897653	0,1381348	0,00206881
200	0,196865	0,1545984	0,001707332

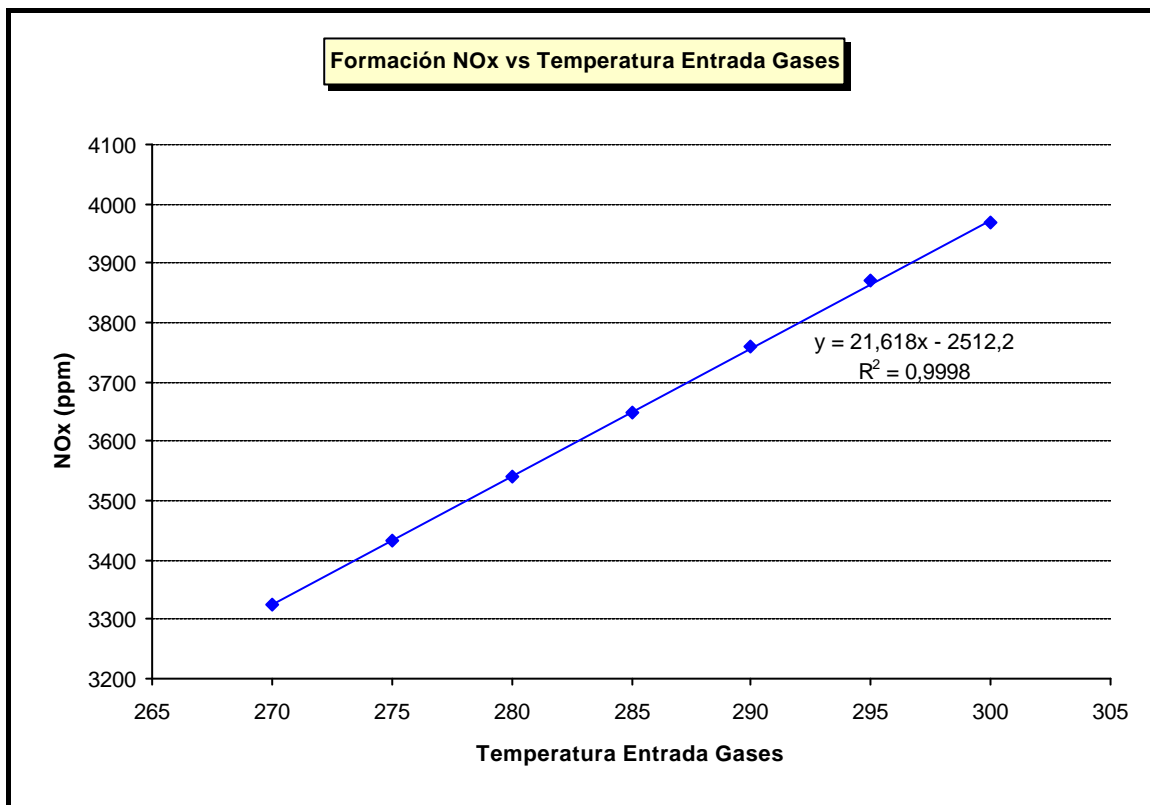
Tabla 4.25. Formación O₂ y formación NOx.

Tal y como se puede ver la variación de formación de NOx respecto a la cantidad de O₂ es destacable. El estudio en la salida sigue una evolución polinómica, mientras que en el interior la evolución se adapta mejor a un cálculo potencial.



D.5. Reducir la temperatura de entrada de los gases.

En el caso original se imponía una temperatura de entrada de los gases, aire y metano de 300°K. Se realizaron diferentes simulaciones reduciendo la velocidad de entrada de ambos, imponiendo la misma reducción en los dos gases. Se iba rebajando en 5° hasta llegar a los 270°K.



Gráfica 4.12. Formación de NOx según temperatura de entrada de los gases.

Como se puede observar el resultado obtenido es una reducción de NOx a menor temperatura de entrada de los gases, obteniéndose una buena correlación que sigue una evolución lineal.

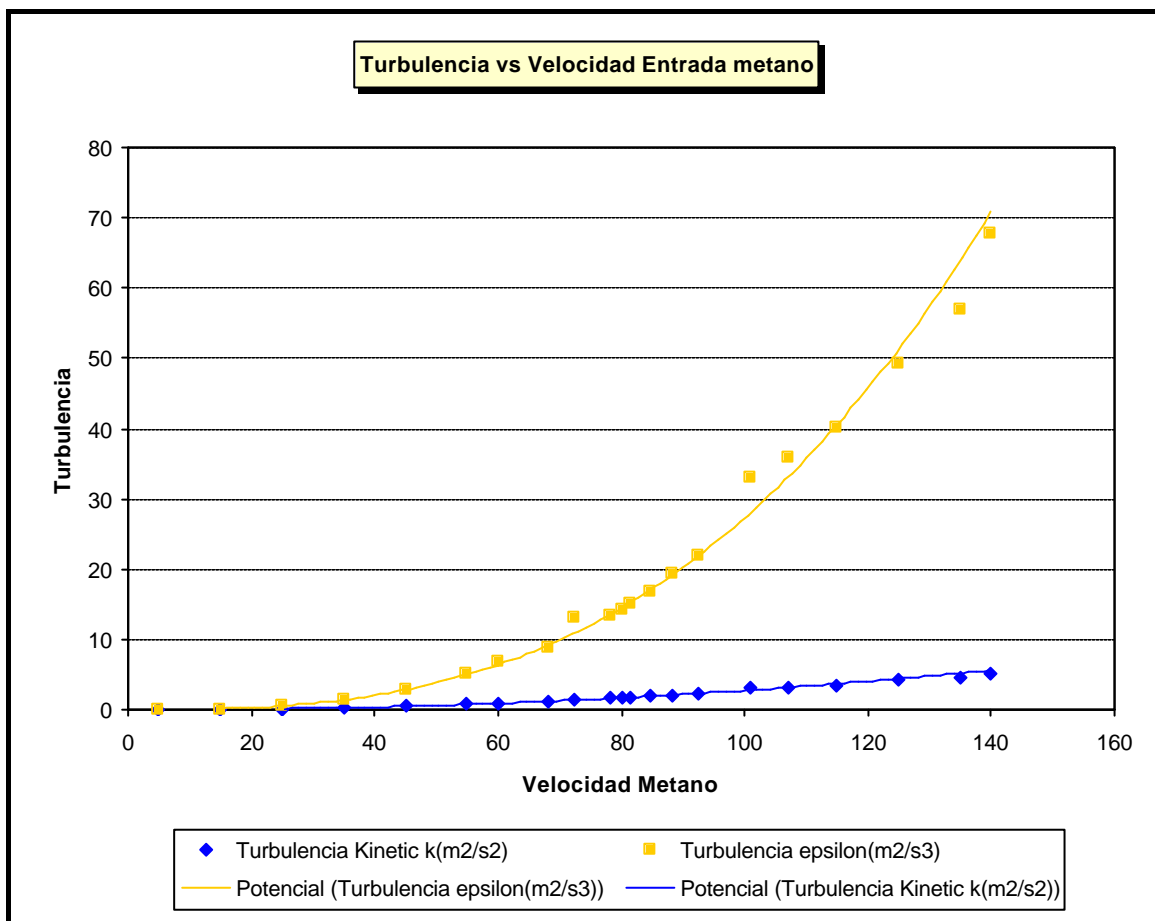
La evolución que sufre es ascendente desde cerca de los 3300 ppm hasta casi los 4000 ppm, con una diferencia de entrada de los gases de 30 °C.

Cabría comentar que a medida que se reduce la temperatura de entrada de los gases se obtiene un pico de temperatura de llama menor, de forma que como se ha comentado en el apartado 4.1, menor cantidad de NOx.

Así que se puede deducir que de forma clara la simulación nos ha mostrado como este factor de temperatura de entrada de gases, influye de forma notable en la reducción de NOx que interesa conseguir.

D.6. Nivel de Turbulencia:

En este caso se estudiará la influencia que tiene la evolución de la turbulencia en la velocidad del metano, que como se ha visto anteriormente tiene una relación directa con la formación de óxidos de nitrógeno. Una vez sabemos a qué nivel de turbulencia trabajamos, conoceremos qué velocidad del metano tenemos a la entrada del quemador, y recurriendo al apartado 3, (gráfico 4.6) sabremos qué cantidad de NO_x estamos produciendo.



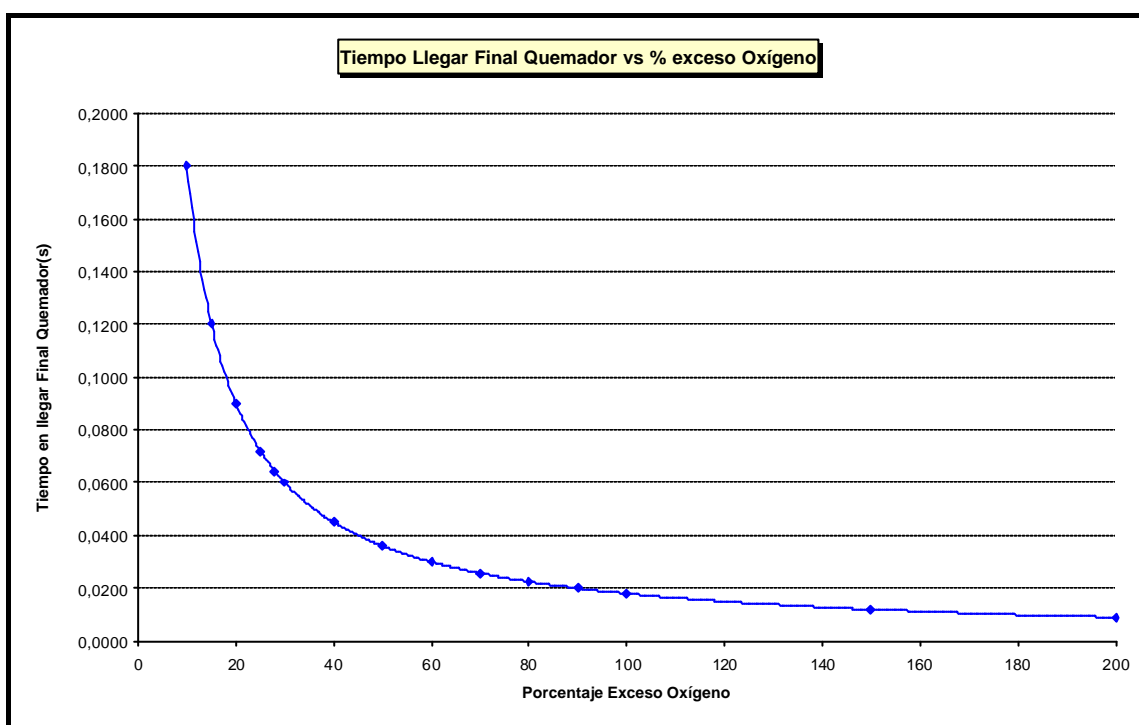
Gráfica 4.13. Influencia de la Turbulencia en la formación del NO_x.

En el gráfico se muestran la evolución de los dos modelos de turbulencia utilizados para mezclar el aire y el combustible en nuestro quemador. Por un lado, el modelo de Turbulencia cinética, o modelo de turbulencia k, representado en color azul, que tiene menor influencia en la velocidad de entrada del metano, ya que presenta una variación de forma potencial, pero todo a un nivel de turbulencia entre 0 y 10%. En cambio, representado en color amarillo, se encuentra el segundo modelo aplicado, el modelo epsilon, que como se puede ver abarca un mayor rango de diferencia de turbulencia para llegar a diferentes velocidades de entrada del metano. Para obtener la velocidad máxima estudiada, ha de llegarse hasta cerca del 70% de turbulencia. En este caso, este modelo si que presenta una evolución potencial de forma clara.

D.7. Tiempo residencia

Un posible resultado de estos métodos sería limitar a un mínimo el tiempo de residencia a las temperaturas pico. Si la temperatura en la zona de combustión se puede disminuir, las tasas de reacción se convertirán entonces en el factor limitante. A temperaturas más bajas, la cinética de formación es más importante que la cinética de descomposición, puesto que no se llega al equilibrio.

Podrían mostrarse dos posibles perfiles de temperatura contra tiempo para un elemento gaseoso que pasa por una zona de combustión. Si el elemento se mantiene a una temperatura elevada durante un tiempo considerable es un perfil indeseable. En cambio si, puede obtenerse con una tasa de remoción elevada, la tasa de formación del NO se vería amortiguada y se formaría en último término una menor cantidad de dióxido de nitrógeno. Este es el perfil que se desea.



Gráfica 4.14. Tiempo en llegar al final del quemador

Para determinar el tiempo que se tarda en atravesar toda la longitud del quemador, se observaron y anotaron las velocidades que se obtenían en cada caso simulado a diferentes porcentajes de oxígeno, y como se conoce la longitud del quemador, podemos determinar el tiempo que se ha tardado en realizar todo el proceso de combustión y en llegar la llama al final del quemador.

Como se observa la evolución sigue un caso potencial, donde con menor porcentaje de oxígeno se obtiene un elevado tiempo, a medida que aumentamos el porcentaje la reducción es destacada, hasta llegar un punto en el que la reducción no es tan destacada, y las variaciones son menores.

D.8. Variación Número Reynolds

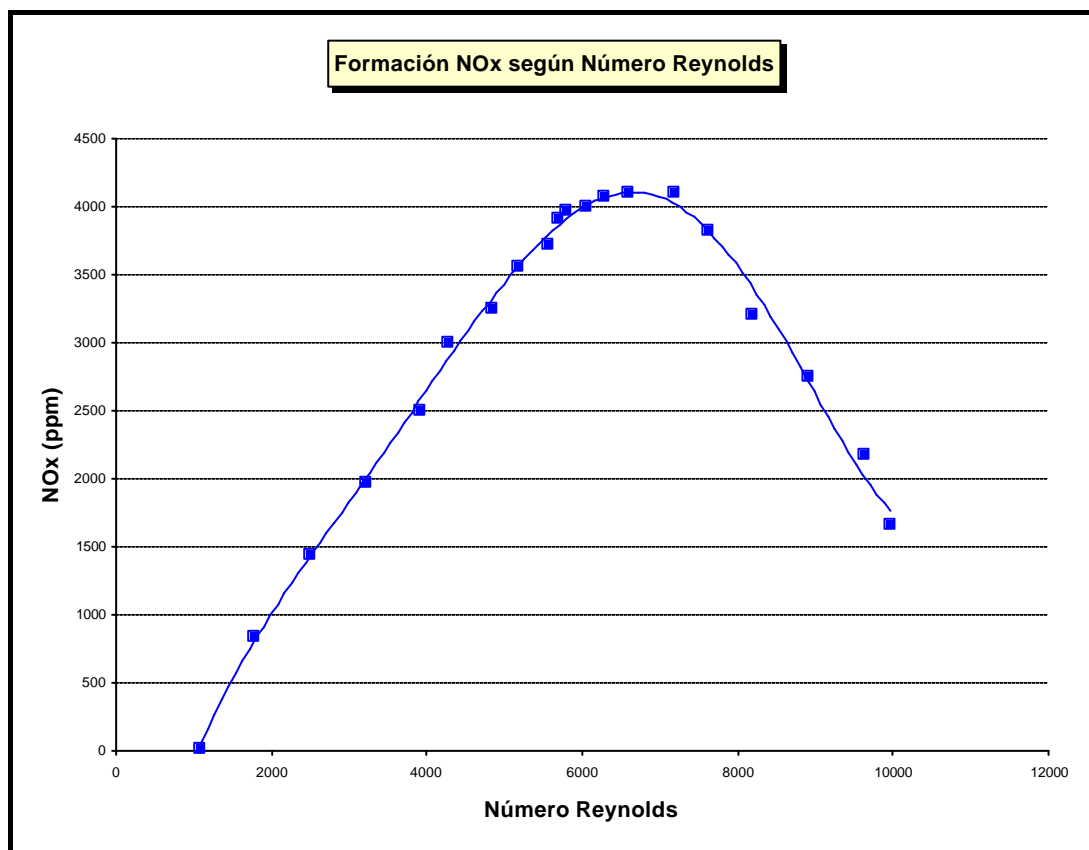
Calcularemos el número de Reynolds para todos los casos estudiados, ya que cada uno de ellos, tiene una velocidad diferente del combustible. El resto de parámetros para realizar este cálculo son constantes. De esta forma obtendremos la curva que relaciona este número adimensional obtenido en cada caso particular con la formación de NOx que se produce en cada uno de estos estudios.

En la siguiente tabla se puede observar la fórmula, las variables a introducir en la fórmula y posteriormente, una vez conozcamos el valor de Reynolds, sabremos el tipo de régimen que tendremos en cada caso.

Fórmula	Variables	Tipos Régimen
$Re = \frac{d \cdot u \cdot \rho}{h} = \frac{d \cdot u}{\nu}$	d = diámetro = 0,05m u = velocidad metano ν = viscosidad cinemática = $7,017 \cdot 10^{-5}$	$Re < 2000$ R. Laminar $2000 < Re < 3000$ R. Transición $Re > 3000$ R. Turbulento

Tabla 4.26. Cálculo del Número Reynolds.

La gráfica que relaciona los números de Reynolds en cada caso con su formación de NOx es la siguiente:



Gráfica 4.15. Formación NOx según Número Reynolds

En la siguiente tabla se puede ver de forma clara los datos representados en el gráfico de arriba. Como se puede ver el gráfico primero pasa por tres casos de régimen laminar, y es en éstos donde la formación de NO_x es menor. Posteriormente, se pasa por un régimen en estado transitorio, para después llegar de lleno a régimen turbulento, es en esta zona donde aumenta la formación del contaminante, hasta llegar a un límite, en el cual se produce el efecto contrario, haciendo que a regímenes turbulentos elevados haya disminuido considerablemente esta formación.

Número Reynolds	Formación Nox (ppm)	Tipo de régimen
9975	1447,023179	Turbulento
9618,75	1659,76065	Turbulento
8906,25	2180,356044	Turbulento
8193,75	2752,362019	Turbulento
7623,75	3210,360306	Turbulento
7196,25	3819,202897	Turbulento
6590,625	4109,031646	Turbulento
6284,25	4109,50604	Turbulento
6042	4072,226729	Turbulento
5792,625	3998,481353	Turbulento
5700	3967,205207	Turbulento
5571,75	3916,490915	Turbulento
5165,625	3727,230501	Turbulento
4845	3563,00587	Turbulento
4275	3243,239992	Turbulento
3918,75	3006,613373	Turbulento
3206,25	2500,290256	Turbulento
2493,75	1971,547083	Transición
1781,25	1435,724066	Laminar
1068,75	841,1447985	Laminar
356,25	10,96904804	Laminar

Tabla 4.27. Formación Nox según Número Reynolds y tipo de Régimen.



E.- Recirculación de gases de salida (FGR):

Hay numerosos métodos para reducir los picos de temperatura en la región de la llama donde se forma el NO_x. Entre estos, algunos de los más efectivos para la reducción del NO_x térmico, son la recirculación de gases de escape y inyección de vapor o agua. Estas técnicas suponen la mezcla de un fluido auxiliar de bajo oxígeno antes de la zona inicial de combustión. Este incremento de masa, con un nivel total menor de oxígeno, actúa como un diluyente para una menor temperatura del pico de llama y niveles locales de oxígeno menores en la zona de la llama. Esto disminuye el ratio de formación del NO_x así como también el punto de equilibrio, el cual vuelve a reducir las emisiones reales de NO_x térmico. [28]

Si bien otras técnicas pueden ser efectivas en el control de las emisiones de NO_x térmico, el FGR ha estado encontrado como el método más efectivo en términos de coste, estabilidad de llama y efectos sobre otras emisiones.

Generalmente, otras técnicas como el uso de fuel o aire por etapas estiran la llama, haciéndola más larga y en muchos casos más ancha. Dependiendo de la configuración del interior, llamas potencialmente más largas y anchas son preocupantes. Pueden también contribuir a incrementar las emisiones, combustibles tales como monóxido de carbono. En comparación con otros métodos, la adición de FGR tienen el menor efecto en el ancho y largo de la llama.

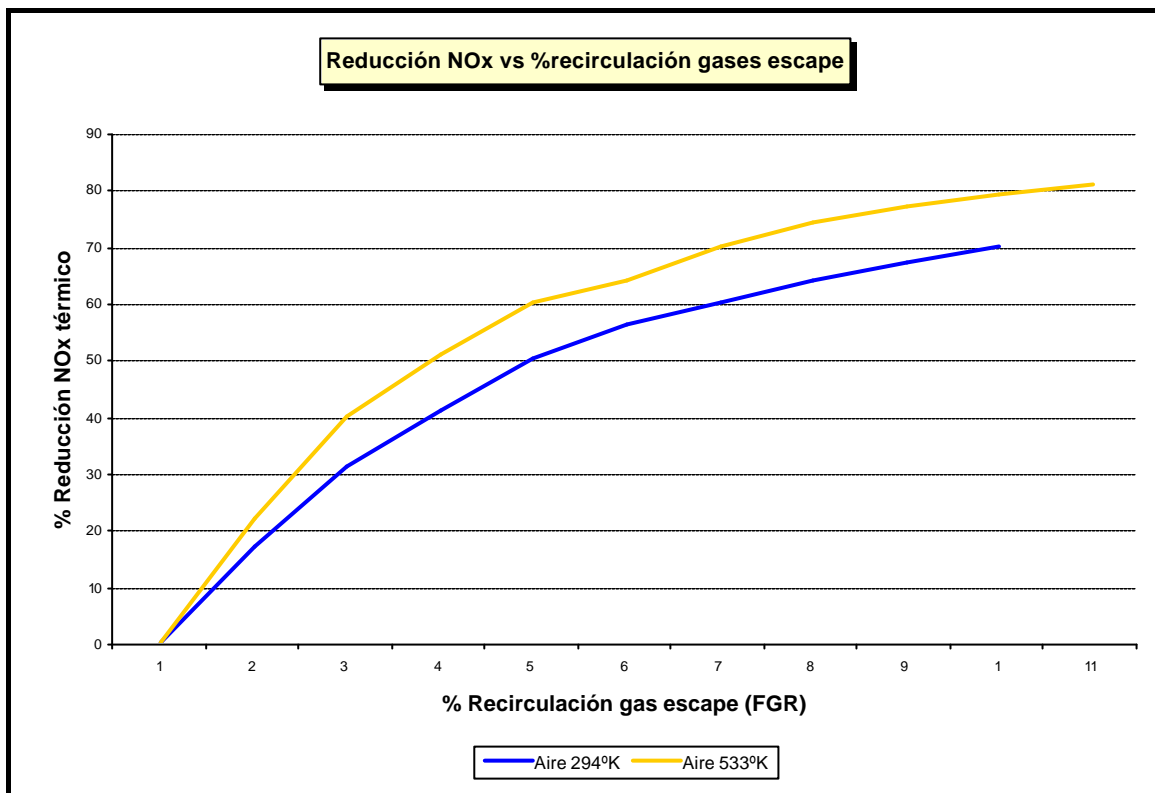
Al añadir FGR se tiene el menor impacto en los niveles de exceso de aire requerido para una combustión completa estable, debido a que de hecho el aire de combustión y los FGR pueden ser mezclados uniformemente antes de la zona inicial de llama.

Debido a que no se gasta calor latente en los FGR, el uso de esta técnica tiene un efecto insignificante en la eficacia total. El único coste apreciable asociado con esto es la energía necesaria para recircularlos a través de un ventilador externo. En muchos casos, el efecto neto de los FGR en la eficiencia de la caldera sería del orden de 0,2 a 0,4% puntos de reducción. En comparación, el uso de la inyección de vapor puede reducir la eficiencia de la caldera hasta un 2 o 4%, el cual ha de incrementar el coste del vapor/agua, que deberá ser añadido al mismo.

El añadir los FGR para la reducción de NO_x dependerá de la aplicación de parámetros específicos tales como tipo de combustible, instalación de ventilador de tiro forzado, temperatura del aire de combustión, cantidad de FGR requerido y tipo de sistema de control automático de combustión.

En aquellas aplicaciones en las que se quema fueloil pesado, con azufre o nitrógeno ligado, a menos que el quemador y el conducto estén contruidos de acero inoxidable, los FGR han de ser cogidos y transportados en un conducto independiente para evitar la corrosión del quemador, para condensación del ácido sulfúrico y nítrico.





Gráfica 4.16. Reducción del NOx térmico vs %recirculación gases escape (FGR)

Para calderas grandes con múltiples quemadores, añadir FGR es más complejo. Normalmente, se coloca en el conducto del aire, aguas arriba del cajón de aire, un mezclador estático. Para inyectar los FGR se utiliza un ventilador, que inyecta los FGR en el aire de combustión, antes de la misma.

Aunque el uso de FGR podría ser considerado en calderas con múltiples quemadores y que queman gas natural o aceites ligeros, normalmente estas calderas son grandes y pueden tener el fueloil como combustible reserva o incluso como primer combustible. La corrosión en el ventilador de tiro forzado y el conducto puede ser un problema. En sistemas con fueloil pesado, cuando se utiliza FGR, normalmente se inyecta en el conducto de aire de combustión justo aguas arriba del cajón, con las partes críticas del quemador expuestas a los FGR usualmente contruidos de acero inoxidable. El uso de aire de combustión precalentado ayuda realmente a prevenir la corrosión para los ácidos sulfúricos y nítricos asociados a la combustión de fuel pesado, cuidando la condensación que de otra manera afectaría a las superficies metálicas frías en operación normal. En calderas que utilizan fueloil y estén paradas llegando a enfriarse, la condensación de los FGR en superficies de acero a carbono puede ser un problema, incluso si se utiliza aire precalentado en operación normal.

Cuando el uso de un quemador de bajo NOx por si mismo no reduce bastante el NOx se utiliza en gran medida la FGR como técnica de reducción para calderas package que queman gas y/o fuel ligero.



F.- Quemadores de bajo NOx multietapas, en calderas de tubos de agua.

Se han desarrollado progresos en quemadores de bajo NOx para utilizar en calderas industriales sin comprometer el rendimiento del sistema. Estos quemadores, pueden incorporar mecanismos de reducción de NOx con un mínimo impacto en la forma de la llama, vibración inducida de la combustión, distribución del calor, elasticidad, pérdida de carga y de todo el sistema. [29]

Los quemadores generalmente tienen dos zonas separadas de aire de combustión. La primera utiliza un deflector isocinético para establecer una zona con fuerte recirculación en el centro de la llama, directamente aguas debajo de la tobera del quemador, que maximiza la estabilidad del quemador sin incrementar el ancho de la llama. El aire de la combustión secundaria se inyecta vía una zona anular, localizada entre la periferia del deflector y el interior de la tobera del quemador. Un registro de palas ajustable es utilizado para controlar el giro del aire secundario para una forma óptima de la llama y una óptima turbulencia y así conseguir una elasticidad amplia. En muchas instalaciones, la posición de las palas puede ser modulada automáticamente, con la petición de fuego, para elasticidades que excedan de 10:1. Para un ajuste adicional final de la forma de la llama se utiliza un registro anular / central. Para asegurar una distribución equilibrada del aire, la entrada a las secciones anulares y central está envuelta con una chapa perforada. Las entradas de gas en la zona de combustión se realizan mediante unos spuds que circunvalen la zona anular.

Estas características son especialmente importantes cuando estos quemadores se utilizan en calderas con grandes liberaciones de calor en la sección y cuando se necesitan grandes cantidades de FGR.

Las características de reducción de NOx de un quemador DAF son:

1. FGR interna por medio de una zona central de recirculación, que reduce el O_2 y el pico de temperatura por lo que consigue reducir el NOx térmico
2. Taladrado de los spuds multietapa por el control de la mezcla aire combustible y limitar la formación del NOx puntual.
3. Una llama vacía con zonas de llama separadas por reducciones adicionales de picos de temperatura.

Las características típicas por un diseño apropiado de un quemador de bajo NOx es resumen en el siguiente: [30]

1. Emisiones de NOx por debajo de 30 ppm con una cantidad mínima de FGR y menores de 0,1 lb/MMBTU de NOx sin el uso de FGR en muchas aplicaciones que queman gas natural.
2. Exceso de aire del 10% cuando se quema gas sin FGR y del 12% al 15% con fueloils. Excesos de aire ligeramente superior cuando se utiliza FGR.



Reducción del NOx “antes” del combustible

La sustitución del combustible es de largo la técnica de mayor eficacia en la reducción del NOx. Esto ha permitido que lugares como California del Sur cumplieren lo que es el menor estándar de NOx del mundo. Estos límites no sólo han sido posibles por la sustitución de los combustibles habituales por gas natural, como es el combustible que se utiliza en nuestros casos de estudio, o por algún otro combustible limpio.

Otros tipos de combustibles líquidos llamados “lo-NOx”, no están disponibles todavía en los mercados de California como un combustible suplementario. Tan sólo tienen un contenido en nitrógeno ligado al combustible tan bajo como 0,002%, lo que hace que tan sólo se añadan 2 ppm de NOx y que con estos combustibles en combinación con la técnica de recirculación de gases puedan determinarse emisiones muy bajas de NOx.

El uso de estos combustibles normalmente está limitado por su coste

▪ Utilización otros combustibles: Fuel Oil.

La combustión del fuel oil tendrá que luchar con el NOx térmico y el Fuel NOx asociado con el nitrógeno químico contenido en el fuel.

Las técnicas utilizadas para reducir la formación del fuel NOx se dirigen en los siguientes aspectos:

Mientras sólo una fracción del total del nitrógeno del fuel se convierte en NOx, el fuel NOx total puede ser sustancial, normalmente dos o tres veces el valor de NOx térmico. Esto significa que las tecnologías para obtener un bajo nivel de NOx han de dirigirse en las dos direcciones, reducir tanto el NOx térmico como el fuel NOx.

Combustible	Térmico+Fuel NO	Fuel NO	Térmico	Puntual
Gas Oil	0,0052356	0,00483735	0,0023035	0
Metano	0,003629379	0	0,003585043	0,00016741

Tabla 4.28. Fracciones máscas de formación NOx según el tipo de combustible.

Si miramos los resultados obtenidos vemos como en la utilización del fuel oil en nuestro caso original se cumple con lo anteriormente comentado, la formación del fuel NO es superior a la formación de NOx térmico, algo más del doble. Como se puede ver en la utilización del fuel oil, la formación del NOx puntual es cero. Y en el otro extremo, en la utilización de metano, se tiene formación de NOx térmico y NOx puntual y la formación de fuel NO es cero.



➤ **Técnicas para reducir la formación del fuel NOx:**

El ambiente óptimo para minimizar las emisiones de fuel NOx es generar una alta temperatura (con muy poco oxígeno) en la zona primaria con un tiempo de residencia suficientemente largo para minimizar el número de nitrógenos liberados para formar NOx con oxígeno. Una vez que las reacciones de NOx han llegado a un mínimo, el aire de la combustión es añadido lentamente hacia abajo para permitir la combustión sin incrementar significativamente el NOx térmico, en el total de las emisiones. [29]

Las aproximaciones para reducir el fuel NOx son:

1. Crear una zona rica en combustible (con muy poco oxígeno).
2. Mezclar lentamente el aire secundario para completar la combustión.
3. Tiempo de residencia en la zona primaria mayor o igual 0,5 segundos.

Reducción del NOx después de la combustión

Las técnicas de reducción del NOx en el final del proceso están enfocadas a limpiar o destruir el NOx en los gases después de que éstos han sido formados durante el proceso de combustión, y antes de que sean lanzados a la atmósfera a través de la chimenea. Los reactores Catalíticos Selectivos (SCR), que destruyen el NOx por medio de la inyección de amoníaco y un catalizador para transformarlo en agua y N_2 , están entre los más efectivos. Con los SCR, pueden llegarse a emisiones de 9 ppm.

Por el contrario, el coste asociado por el uso de SCR hace todavía que esta técnica sea extremadamente cara para muchas aplicaciones.



➤ **Otras técnicas de bajo NOx**

❑ *Combustión parcial*

Se utiliza sólo en múltiples quemadores y a menudo con otras técnicas de bajo NOx: algunos quemadores queman con una mezcla rica en combustible y otros con pobre. Son posibles reducciones moderadas del NOx de 25 a 30%. [29]

❑ *Funcionamiento con bajo exceso de oxígeno*

La idea es limitar la cantidad de aire para así reducir la cantidad de oxígeno disponible en el interior y alargar el proceso de combustión para impedir la formación de NOx. De nuevo esta técnica está limitada normalmente a múltiples quemadores, liberaciones bajas de calor en calderas grandes. Las reducciones de NOx están sólo en rangos de 10-15% quemando gas y del 15-20% quemando fuel. Raras veces esta técnica de bajo NOx, se utiliza sola debido a la complejidad del control de la combustión y a los diseños necesarios del quemador / caja de aire para operar a niveles de aire extremadamente bajos, mientras ha de mantenerse una completa y / o eficiente combustión.

❑ *Reburning:*

Utilizado principalmente en calderas utility grandes con multiquemadores. Similar al aire por etapas, el combustible secundario se inyecta aguas abajo para completar la combustión. En calderas equipadas con múltiples filas de quemadores, inyectores separados son localizados por encima de la fila superior de los quemadores. Esto pretende reducir los niveles de NOx por debajo del nivel de NOx en un 40 o 50%. Generalmente se considera complejo para calderas de tipo industrial.

❑ *BOOS (quemadores fuera de uso)*

Normalmente limitado a calderas utility donde se utiliza un gran número de quemadores. Esto es realmente una forma de aire por etapas, donde un número específico de quemadores o filas de ellos están fuera de servicio. El fuel adicional es introducido a través de los quemadores en servicio, con los quemadores fuera de servicio suministrando el aire adicional para completar la combustión. Pueden conseguirse reducciones del 15-30% con esta técnica.



Resumen de las técnicas utilizadas

Las principales técnicas de modificación de la combustión que se han nombrado son:

1. Alimentación escalonada de aire. Posibilita variaciones estequiométricas de las zonas de combustión primaria y secundaria. Esto, conjuntamente con el atomizador de mezcla interna posibilita una mayor presencia de aire en el quemador para reducir los NOx sin comprometer los niveles de partículas.
2. Alimentación escalonada del fuel-gas.
3. Alimentación escalonada del fuel oil. Los atomizadores adecuados consiguen significativas reducciones de una lanza central, reduciendo el NOx.
4. Inyección de vapor, ya sea por el colector de gas o a través de una lanza central, reduciendo el NOx.
5. Recirculación de gases de escape. Estos se pueden reciclar en el quemador a través de una corona circular entre los flujos primario y secundario o mezclado con el aire de combustión. Con un buen quemador de bajo NOx, la recirculación de gases de escape es mucho menos significativa en términos de reducción de NOx y en la mayoría de los casos no será requerida para conseguir los límites de emisión de NOx deseados.

Para ayudar a decidir el método óptimo de control que ha de utilizarse para reducir el NOx en una aplicación determinada y qué resultados de NOx tendrá, los diseñadores utilizan cualquiera de las técnicas basadas en la simulación por ordenador, como nuestro caso, o corrección de métodos, que están basados en modelos existentes y en datos tomados en campos de instalaciones existentes.

Características del diseño de bajo NOx

Este apartado está extraído de un artículo donde se habla de la segunda generación de quemadores DAF (Dual Air Flow), que es un quemador de bajo NOx desarrollado por Coen Company, cuyo objetivo prioritario es la minimización del compromiso entre la eficiencia y operatividad de una caldera package. [29] [30]

Las características del quemador han de ser:

- La capacidad de obtener 25 ppm de NOx que se utilice conjuntamente con una cantidad razonable de recirculación de gases de salida (FGR), en todas las calderas package industriales que queman gas, sin pérdidas de eficiencia o dificultad de operación.
- La capacidad de obtener 85 ppm NOx, en todas las calderas comerciales que queman gas sin ayuda de recirculación de gases de salida (FGR).
- Restringir absolutamente al mínimo el ruido y las vibraciones, de conformidad con los niveles de ruido determinado por las ingenierías de planta y el personal.



- La capacidad de obtener un rango mínimo de 1/10 en la combustión de gas con un único quemador.
- La capacidad de un ajuste fino de la forma de la llama durante la operación del quemador a demanda de la planta, o peticiones de regulación y operación (por ejemplo, temperaturas del sobrecalentador, emisiones de CO) sin afectar a las emisiones de NOx.
- Prevención en los impactos de llama en las paredes laterales y posteriores, en cargas térmicas sobre las 883000 kcal/h m³.
- Un elevado nivel de eficiencia aerodinámica en la caja del aire.
- La capacidad de obtener bajas emisiones de CO cuando se trabaja con niveles de exceso de aire por debajo del 15%.

□ **Aspectos del diseño:**

El quemador DAF utiliza dos zonas separadas de aire de combustión. La corriente de aire primaria utiliza un deflector de hélice isocinética por establecer una zona de fuerte recirculación en el centro de la llama, directamente aguas debajo de la tobera del quemador.

Por otra banda, la hélice isocinética se diseña para producir localmente un número extremadamente alto de torbelli (ya que maximiza la estabilidad de la llama) y su diámetro relativamente bajo asegura un incremento insignificante en los diferentes grados de torbelli y amplios de llama.

El aire de combustión secundario entra vía zona anular, localizada entre el perímetro de la hélice y en el interior de la tobera del quemador. Un registro de palas ajustables permite adecuar la turbulencia del aire secundario por ayudar a obtener la forma óptima de la llama, de acuerdo con la geometría específica de una forma concreta.

A más o más, el conjunto de caja de aire del DAF, se equipa con un by-pass por un ulterior ajuste afín en todas las condiciones de turbulencia y forma de la llama.

Las entradas de gas se realizan vía “spuds” múltiples en la zona de combustión, denominada “core jet” los cuales circunvalen la zona anular. El taladrado adecuado de los capuchones de los “spuds” es diseñado para tener el máximo tiempo el fuel por etapas en el interior sin exceder las limitaciones impuestas por los requerimientos de la llama. El taladrado de la citada capucha se diseña también para proporcionar niveles locales estequiométricos, compatibles con la máxima estabilidad del quemador y niveles mínimos de ruido. Esto es especialmente importante cuando se utilizan en aplicaciones con altas liberaciones de calor y se utilizan también niveles altos de recirculación de gases de salida (FGR).



5. Estudio económico

En este capítulo, se tratará de realizar unos cálculos estimativos de la realización de un proyecto empresarial basado en el estudio realizado a industrias para mejorar sus condiciones medioambientales y su rendimiento.

La valoración de las actuaciones propuestas en el proyecto es una tarea imprescindible, en tanto que el presupuesto resultante debería ser analizado para programar las inversiones necesarias, en caso de plantear un negocio de este tipo.

Al tratarse de un proyecto empresarial que se dedicaría precisamente a realizar estudios y proyectos a otras empresas y que pueden ser de índole muy diferente, hace que este cálculo económico no pueda, en general, abordarse con un nivel de detalle elevado. Para la valoración de la actuación propuesta se utilizan modelos simplificados de valoración de los componentes necesarios que permite hacer un presupuesto de manera aceptable. [31]

Posteriormente se tratará de determinar el coste de este proyecto si se realizase dentro de una empresa de esta índole, aunque no pueda ser con exactitud.

Para el cálculo económico se destacarán una serie de partidas diferentes. [32]

- *Cálculo de la Inversión*, donde estarán incluidos todos los gastos necesarios hasta la puesta en marcha del proyecto. También se encontrarán los gastos que tendremos por el funcionamiento en los años posteriores de la empresa.
- *Cálculo de Ingresos*, aquí se cuantificarán los ingresos que generaremos.
- *Balance Económico*, a partir de las dos partidas anteriores estudiaremos la viabilidad de nuestro proyecto.

5.1.Cálculo de la inversión

A. Coste de Equipos:

En este caso haremos una separación entre las dos partidas necesarias: los elementos físicos necesarios para completar el proyecto, así como empleo de aplicaciones de carácter general (licencias) y algún software o hardware específico.

□ *Dispositivos Físicos:*

	unidades	coste/unidad	Coste
WorkStation	1	4.884 €	4.884 €
Ordenadores	2	700 €	1.400 €
Impresora Láser BN	1	340 €	340 €
Impresora Desjeht Color ¹	1	120 €	120 €
SAI ²	2	600 €	1.200 €
TOTAL DISPOSITIVOS FÍSICOS			7944 €

Tabla 5.1. Coste de dispositivos físicos.



¹Impresoras, ambas estarán compartidas por toda la oficina.

²SAL: Batería de corriente al servidor, protección de equipos en caso de fallo de la corriente.

□ *Dispositivos de Software:*

	Duración (años)	Coste Anual	Coste
Licencia de Fluent ³	1	2.114 €	2.114 €
Licencias Adicionales Fluent: Paquete Medioambiental ³	1	780 €	780 €
Licencia Linux	1	0 €	0 €
Dominio de Internet ⁴	1	500 €	500 €
TOTAL DISPOSITIVOS SOFTWARE			3314 €

Tabla 5.2. Coste de dispositivos de Software.

³Coste de las licencias para nuestro proyecto. En una industria el precio variaría.

⁴Necesidad de una página WEB para publicitar la empresa.

B. Coste de Constitución de la empresa

En este apartado se consideran todos aquellos factores que son necesarios para poder instalar e iniciar el trabajo de la empresa.

	Coste Mensual	Duración (meses)	Coste
Alquiler del Local	650	12	7.800 €
Fianza Local	650	2	1.300 €
Constitución de la Sociedad (S.L)			3.400 €
Gastos Gestoría	60	12	720 €
TOTAL CONSTITUCIÓN EMPRESA			13220 €

Tabla 5.3. Coste Constitución empresa.

C. Coste de Materiales

En este apartado se considerarán los materiales que son necesarios para el funcionamiento de la empresa. En este caso, se trata principalmente de preparar lo que sería el funcionamiento de una oficina.

	unidades	Coste/unidad	Coste
Mobiliario Oficina ⁵			2.500 €
Maquinaria Adicional:			
Calefactor	1	150	150 €
Aire Acondicionado	1	400	400 €
Material Fungible ⁶			2910 €
TOTAL MATERIALES			5960 €

Tabla 5.4. Coste Materiales Oficina.

⁵Se necesitarán 3 mesas oficina, sillas, recepción, archivadores....

⁶Material fungible se disecciona en la siguiente tabla.

⁷Tintas: Color ? 3 cartuchos al mes a un precio de 35 €

BN ? 1 cartucho cada dos meses a un precio de 60 €



	Coste Mensual	Coste
Planos	16 €	190 €
Archivadores y encuadernaciones	23 €	270 €
Hojas / Sobres	13 €	150 €
Materia oficina varios	17 €	200 €
Unidad de cintas copias seguridad (Backup)	25 €	300 €
Aguas y varios para consumir	15 €	180 €
Tintas Impresora ⁷	135 €	1.620 €
TOTAL MATERIAL FUNGIBLE		2.910 €

Tabla 5.5. Coste Material fungible.

D. Coste de Servicios

Se trata de costes que sin ser imputables directamente al proyecto, soportan la infraestructura que permite la realización de este proyecto. [33]

	Duración (meses)	Coste Mensual	Coste
Agua	6	40 €	240 €
Energía eléctrica	6	120 €	720 €
Teléfono fijos y móviles	12	80 €	960 €
Conexión Internet	12	40 €	480 €
Limpieza Mantenimiento	12	120 €	1.440 €
Impuestos Locales			400 €
TOTAL SERVICIOS			4240 €

Tabla 5.6. Coste de servicios.

E. Coste de Personal.

En este apartado consideramos el personal que forma la empresa. El salario de cada uno depende de su categoría profesional.

	Salario Anual	Coste
Ingeniero Químico ⁸	30.000 €	30.000 €
Técnico Informático	17.000 €	17.000 €
Comercial ⁹	14.000 €	14.000 €
Becario ¹⁰	7.500 €	7.500 €
Dietas y Representación ¹¹	2.000 €	2.000 €
TOTAL PERSONAL		72.500 €

Tabla 5.7. Coste de personal. [33]

⁸ Se considera un Ingeniero Junior (Titulado superior con menos de 5 años de experiencia)

⁹ El sueldo del comercial depende en gran parte de las comisiones que obtiene.

¹⁰ El becario está contratado por 5 horas diarias.

¹¹ Es necesario un % de representación para viajes y visitas a clientes y para publicidad

Factores complementarios.

De la aplicación de los anidamientos de las partidas comentadas a sus correspondientes precios, resulta la cantidad estrictamente necesaria para la constitución de la empresa. Esta cantidad se ve afectada en unos porcentajes en concepto de:



- *Imprevistos*: factores imprevistos de todo tipo. Hay que recordar que el estudio es a nivel de planificación. Se consideran en esta partida tanto los imprevistos que puedan surgir en la adquisición de equipos, o materiales, como las variaciones que puedan producirse durante el proyecto de las mismas respecto de las condiciones supuestas. El porcentaje de incremento se estima en el 10%.

SUBTOTAL	107.258 €
más 10% de imprevistos	10.726 €

Con todo ello el coste total de nuestra inversión es:

TOTAL INVERSIÓN	117.983 €
------------------------	------------------

Evolución Gastos

A continuación se muestra la evolución de gastos sufrida desde el inicio de la empresa (año 0) hasta un horizonte de estudio de 6 años.

Para realizar el estudio se han tenido en cuenta varias premisas:

- Los precios de compra de materiales, costes de servicios y Coste de Personal se incrementan con el IRPF, que en este caso se ha considerado un incremento del 3% cada año.
- Como se puede ver la inversión inicial de Equipos (Informáticos) tiene un periodo de amortización distinto dependiendo de los elementos que estén involucrados:
 - Los ordenadores (2) y la impresora Desjekt tienen una vida útil de 3 años.
 - Mientras que la WS, la impresor Láser y las baterías SAI tienen una vida útil del doble, 6 años.
 - A todos ellos, se les ha considera un valor residual del 20% una vez han de ser sustituidos.
- A partir del Año 4, ya que el volumen de negocio se ha incrementado considerablemente, se aumenta la plantilla de trabajadores con un nuevo becario, 5 h diarias, con lo que ese año será necesaria la adquisición de un ordenador extra.
- En cuanto a los gastos de constitución de la empresa únicamente se considera el precio del local y el gasto de gestoría en los años siguientes.
- De material, únicamente será necesario considerar el material fungible, ya que el resto se trata de mobiliario, y equipos de frío y aire que no necesitarán renovación.



	Año 0	Año 1	Año 2	Año 3	Año 4	Año 5	Año 6
A. Coste Equipos							
Equipos	7.944 €	- €	- €	1.246 €	784 €	- €	6.818 €
Software	3.394 €	3.496 €	3.601 €	3.709 €	3.820 €	3.935 €	4.053 €
B. C.Constitución							
Constitución	13.220 €	8.776 €	9.039 €	9.310 €	9.589 €	9.877 €	10.173 €
Material	5.960 €	2.997 €	3.087 €	3.180 €	3.275 €	3.373 €	3.475 €
C. Coste Servicios	4.240 €	4.367 €	4.498 €	4.633 €	4.772 €	4.915 €	5.063 €
D. Coste Personal	72.500 €	74.675 €	76.915 €	79.223 €	89.839 €	100.775 €	112.038 €
TOTAL	107.258 €	94.311 €	97.140 €	101.301 €	112.080 €	122.875 €	141.619 €
TOTAL +Imprevistos	117.983 €	103.742 €	106.854 €	111.431 €	123.288 €	135.162 €	155.781 €

Tabla 5.8. Evolución gastos en un periodo de seis años.

5.2. Ingresos generados.

A continuación se ven los ingresos generados por nuestro sistema. Se considera que se empieza con un volumen de negocio que corresponde a 2 simulaciones al mes. Éstas se aumentarán en dos simulaciones más cada año. El precio de la simulación es totalmente estimativo, ya que esta dependerá mucho del tipo de simulación de la que se trate.

	Año 0	Año 1	Año 2	Año 3	Año 4	Año 5	Año 6
Simulaciones/Año		24	26	28	30	32	34
Precio medio por Simulación	7.500 €	7.725 €	7.880 €	8.037 €	8.198 €	8.362 €	8.529 €
INGRESOS	0	185.400 €	204.867 €	225.039 €	245.935 €	267.577 €	289.987 €

Tabla 5.9. Ingresos producidos en un periodo de seis años.

Fuentes de financiación

Se considera que al inicio del negocio no se disponen de ningún tipo de ingresos económicos, con lo que toda la inversión inicial será financiada.

Inversión inicial	117.983 €
Anualidades	6
Interés	8,00%
Cuota anual	25.522 €

Año	Intereses	Retorno capital	Cuota anual	Deuda cancelada	Deuda pendiente
0					117.983 €
1	9.439 €	16.083 €	25.522 €	16.083 €	101.900 €
2	8.152 €	17.370 €	25.522 €	33.453 €	84.531 €
3	6.762 €	18.759 €	25.522 €	52.212 €	65.772 €
4	5.262 €	20.260 €	25.522 €	72.472 €	45.512 €
5	3.641 €	21.881 €	25.522 €	94.352 €	23.631 €
6	1.890 €	23.631 €	25.522 €	117.983 €	0 €

Tabla 5.10. Financiación de la empresa.

Total intereses	35.146 €
Pago total	117.983 €



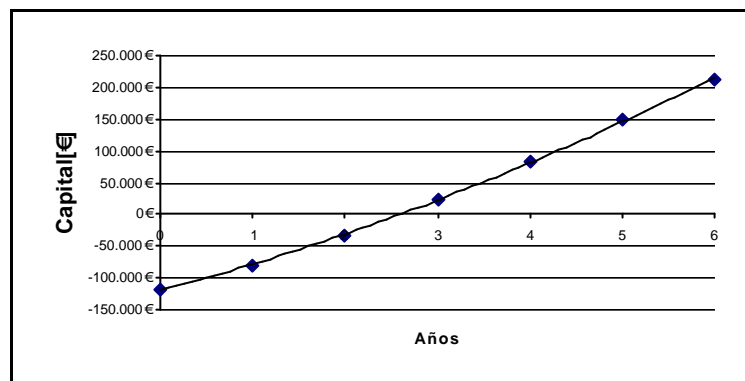
5.3. Balance económico. Cuenta de Resultados

Año	0	1	2	3	4	5	6
Ingresos (+)	0 €	185.400 €	204.867 €	225.039 €	245.935 €	267.577 €	289.987 €
Coste producción (-)	117.983 €	103.742 €	106.854 €	111.431 €	123.288 €	135.162 €	155.781 €
Utilidad marginal	-117.983 €	81.658 €	98.013 €	113.608 €	122.647 €	132.415 €	134.206 €
Coste financiero (-)	0 €	9.439 €	8.152 €	6.762 €	5.262 €	3.641 €	1.890 €
Utilidad bruta	-117.983 €	72.219 €	89.861 €	106.845 €	117.385 €	128.774 €	132.315 €
Impuesto sociedades (35%) (-)	0 €	25.277 €	31.451 €	37.396 €	41.085 €	45.071 €	46.310 €
Reparto beneficios (10%) (-)	0 €	4.694 €	5.841 €	6.945 €	7.630 €	8.370 €	8.601 €
Utilidad Neta	-117.983 €	42.248 €	52.569 €	62.504 €	68.670 €	75.333 €	77.405 €
Depreciación y amortización (+)	0 €	11.798 €	11.798 €	11.798 €	11.798 €	11.798 €	11.798 €
Pago a principal (-)	0 €	16.083 €	17.370 €	18.759 €	20.260 €	21.881 €	23.631 €
Flujo neto efectivo	-117.983 €	37.964 €	46.997 €	55.544 €	60.209 €	65.250 €	65.572 €
FNE actualizado	-117.983 €	37.964 €	46.997 €	55.544 €	60.209 €	65.250 €	65.572 €
FNE actualizado acumulado	-117.983 €	-80.020 €	-33.022 €	22.521 €	82.730 €	147.980 €	213.552 €

Tabla 5.11. Cuenta de resultados

Calculamos los tres parámetros que nos indicarán la viabilidad económica de este proyecto: VAN, TIR y PayBack o período de retorno.

VAN	213.552 €
TIR	36%
PB	2,6 años



Gráfica 5.1. Período de retorno de la inversión.

El VAN positivo nos indica que la inversión en el proyecto produce beneficios superiores a los que podrían obtenerse invirtiendo la misma cantidad a la tasa de referencia. Su valor absoluto positivo es el incremento patrimonial actualizado que experimenta la empresa por acometer el proyecto, con lo que cuanto más alto sea, mejor será el proyecto que se pretende realizar. [32]

LA TIR se define como el valor de i que anula el VAN. Entre diversos proyectos de inversión se elegiría el de TIR más alta y, además, el TIR debería ser mayor que el interés del mercado. Es interesante como información complementaria.

Finalmente podemos considerar un tercer indicador, el denominado PERÍODO DE RETORNO (PR). Este indicador calcula el plazo en el cual los flujos netos de efectivo actualizados a la tasa prefijada igualarán al valor de las inversiones actualizadas a esa misma fecha. Da una idea de la velocidad a la que el proyecto "recupera" para la empresa la liquidez que ha inmovilizado al acometerlo.

En nuestro caso el período de retorno es inferior a los 3 años.



5.4. Cálculo estimativo del coste de este proyecto

En nuestro caso todos los gastos han sido necesarios durante un periodo de seis meses.

Los gastos han sido divididos por el periodo exacto en el que se han utilizado. Es decir por ejemplo para la WS se considera que su periodo de uso total se estima en seis años, y lo utilizamos tan sólo 6 meses. Además es compartida por dos personas durante el tiempo en el que se utiliza en este proyecto.

Con las licencias de Fluent ocurre algo similar, ya que éstas son de un año y válidas para 3 usuarios. La licencia NOx únicamente fue utilizada por mí, pero por un periodo de 1 mes.

Igualmente se ha seguido el mismo procedimiento para los gastos del local, y servicios que se dividen en el periodo estimado para este proyecto, y entre las 5 personas que forman parte del despacho y que hacen uso de estos servicios.

Igual se ha hecho con las impresoras y el material, tanto mobiliario como fungible, que es compartido por la totalidad del despacho.

En cuanto a las horas de trabajo, las realizadas por el proyectista se consideran que se encuentran en los epígrafes más económicos de sueldo. Por otro lado también se consideran la labor realizada por el tutor y algún agente externo cualificado (informático) que ha colaborado, y que se sitúan en la parte alta.

Como se puede ver el presupuesto obtenido no es demasiado costoso, y éste sería mucho mayor si no se tratase de una simulación, y se realizase un proyecto experimental sobre el mismo modelo simulado.

	Coste
Workstation	203 €
Ordenador	117 €
Impresoras	50 €
Licencia Fluent	369 €
Licencia NOx	48 €
Local	750 €
Material Oficina	596 €
Servicios	424 €
Trabajo Proyectista	7.000 €
Trabajo Tutor y personal cualificado	700 €
TOTAL COSTE PROYECTO	10.307 €

Tabla 5.12. Coste Proyecto.

6. Conclusiones

Una vez concluida la realización del proyecto ya se puede pasar a extraer las conclusiones a las que se llega tras la experiencia. Este capítulo está dividido en cuatro apartados bien diferenciados.

En el primero se comentarán las conclusiones sobre el proyecto en general para pasar a describir más concretamente un caso práctico surgido durante el proceso, el de la formación de NO_x, en el segundo de los apartados. Ya en el tercero se pasará a describir una serie de líneas de actuación posible para seguir desarrollando este proyecto y ampliar los conocimientos adquiridos hasta la fecha. Para finalizar se realizará una valoración personal del proceso y la experiencia obtenida con la realización de este trabajo.

6.1. Conclusiones generales

Los objetivos principales de este proyecto eran la evaluación de un Software de simulación, FLUENT. Para ello se planteó un problema inicial que, por conveniencia, resultó ser el de simular el comportamiento de dicho programa al emular un quemador de gas natural.

Tras la realización del experimento y la comparativa con el conocimiento teórico, previamente analizado, podemos llegar a la conclusión que FLUENT es una herramienta más que válida para poder experimentar procesos químicos a un bajo coste de tiempo y dinero. Es pues una manera de trabajar que debería ir imponiéndose cada día más en el ámbito de la Ingeniería química por razones más que obvias.

La adaptación al medio de trabajo también resultó bastante cómoda, incluso tratándose de un Sistema Operativo como Linux. Dicho SO, pese a su interfaz gráfica de usuario, muy similar a la de Windows (medio habitual en la universidad), contiene ciertas y trascendentales diferencias que hacen que su comportamiento sea más fiable y más versátil a la hora de trabajar. Otra ventaja de este SO no reside en las características técnicas, sino en las económicas. Se trata de un software libre (tanto el SO como el referente a la ofimática). Es pues otra forma de abaratar los costes de un posible negocio. El único inconveniente de dicho sistema es el de su instalación y la incorporación de nuevos periféricos al mismo (tales como lápices de memoria, impresoras) que pueden y de hecho ralentizaron un poco el inicio del trabajo.

En cuanto al Hardware, podemos comentar que su comportamiento ha sido inmejorable, pudiendo analizar mallas con una precisión de 10^{-3} en superficies y de 10^{-2} en volúmenes. La carga de trabajo (cálculo) en la realización del proyecto se centró en la nueva Workstation pero esto no tiene por que ser así y lo comentaremos más adelante.



Durante el análisis del SW y el HW se presentó una oportunidad inmejorable de estudiar un caso práctico del quemador de gas natural y profundizar en el estudio del simulador. El caso en concreto, como ya se ha comentado en la etapa de desarrollo, fue el de la formación de NOx. Las conclusiones sobre este caso concreto se explicarán en el siguiente apartado. Pero, se puede asegurar, tras trabajar en este caso, que el software tiene una gran versatilidad para estudiar el comportamiento de un proceso variando los diferentes parámetros que intervienen en este proceso.

6.2. Conclusiones sobre un caso práctico: Formación del NOx

Como se ha comentado uno de los objetivos era estudiar la formación de NOx que se producía durante la combustión, variando diversos parámetros que intervienen y comprobar cuando se minimiza esta formación. A continuación se mostrarán las conclusiones que se han obtenido en el estudio sobre cómo minimizar el NOx formado

Lo primero que se ha podido comprobar es cómo la contribución del NOx puntual es prácticamente inexistente en comparación con la del NOx térmico, tal y como se esperaba encontrar. Esto es así ya que el NOx puntual tiene una formación adicional y rápida, y frecuentemente excede la predicción del modelo de Zeldovich.

Se ha corroborado como en la combustión de gas natural no se forma Fuel NOx, ya que no hay nitrógeno químicamente ligado, siendo el NOx térmico la fuente de NOx. La técnica de control se centra en reducir el NOx térmico, incluso a expensas de generar algo de NOx puntual, tal y como veremos en los parámetros estudiados.

- En todos los casos estudiados se ha podido comprobar como la formación de **NOx térmico** es la que se ve más afectada por la *temperatura*. Su punto de equilibrio depende altamente del pico de temperatura, y en menor grado de las concentraciones de N₂ y O₂.
- La formación de **NOx puntual** se minimiza con llamas pobres en combustibles y se maximiza con llamas ricas.
- Deben evitarse atmósferas oxidantes (pobres en combustible), en cambio para reducir el NOx puntual se deberían evitar las zonas ricas en combustible, esto nos indica como existen limitaciones en el control del NOx solamente por estequiometría de la combustión.
- Para reducir este NOx térmico han de reducirse los picos de temperatura y limitar el oxígeno en la zona de reacción primaria.
- Otro parámetro relacionado directamente es el tiempo de exposición a alta temperatura, que intentaremos que sea mínimo, así como reducir el nivel de oxígeno dentro de la zona pico de temperatura.



- Uno de los métodos más efectivos para la reducción del NOx térmico, son la recirculación de los gases de escape. Con ellos se produce un incremento de masa, con un nivel total menor de oxígeno, así se obtiene una menor temperatura de pico de llama y niveles locales de oxígeno menores.
- Un factor estudiado, y algo diferente al resto, es la geometría del quemador. En los dos casos estudiados, aumento del número de inyectores y variación de la longitud, la reducción que se ha conseguido del nivel de NOx térmico ha sido significativa.
- Otro parámetro que influye es el tipo de llama que se tiene, las llamas de difusión presentan una menor formación del contaminante que las de premezcla.
- En el estudio según el número de Reynolds, se ha comprobado como la cantidad mayor de NOx se encuentra en régimen turbulentos.
- La turbulencia es otro de los parámetros que se ha estudiado, ya que ésta tiene relación directa con la velocidad con la que se inyecta el metano.
- A velocidades altas, al aumentar la velocidad de inyección del gas metano, se reduce la formación de NOx debido a que se tiene un menor tiempo de contacto.
- Otro método de reducción es limitar a un mínimo el tiempo de residencia a las temperaturas pico. Así las tasas de reacción se convertirán en el factor limitante.
- La combustión por etapas es un método efectivo para controlar ambos NOx. Con aire por etapas se genera una alta temperatura, zona primaria rica en combustible con un tiempo de residencia bastante largo, así se minimiza la conversión del nitrógeno en atmósfera de bajo oxígeno.
- Se ha comprobado como se produce una reducción lineal del NOx formado con una disminución de la temperatura de entrada de los gases, tanto del aire como del metano, obteniéndose un pico de temperatura menor.

Finalmente, con este estudio se ha podido comprobar los parámetros que se están estudiando para la fabricación de quemadores de bajo NOx, por ejemplo la reducción de NOx en un quemador DAF se basa en:

- Una zona interna con recirculación de gases FGR, que reduce el oxígeno y el pico de temperatura, con lo que se reduce el NOx térmico.
- Control de la mezcla aire / combustible y limitar la formación de NOx puntual.
- Reducciones adicionales de picos de temperatura, y del tiempo de exposición.



6.3. Líneas de continuación

Aunque se ha podido comprobar que el simulador funciona eficientemente al contrastar sus resultados con el conocimiento teórico previamente recopilado, sería más que interesante realizar diversas pruebas más, como por ejemplo:

- Contrastar la capacidad de la workstation (servidor) a la hora de trabajar simultáneamente con un número diverso de usuarios. Esto ayudaría a averiguar si con una licencia de FLUENT se pueden realizar prácticas para los alumnos e incrementar el uso de esta herramienta en la Ingeniería Química.
- En este proyecto se ha probado una pequeña parte de la capacidad de FLUENT. Se debería realizar estas mismas pruebas (no sobre el HW pero si sobre el SW) para los diferentes paquetes de los que este programa dispone.
- Comparar los resultados obtenidos en este simulador con los resultados obtenidos con otros simuladores respecto a los conocimientos teóricos y ver cuál tiene un mejor comportamiento y versatilidad.
- Finalmente, y aunque más costoso en cuanto a tiempo y dinero, sería más que recomendable el plantear un problema a resolver empíricamente y comparar dichos resultados experimentales con los obtenidos mediante el o los programas de simulación sometidos a estas pruebas.

Estas líneas de continuación podrían llegar a formalizarse en la realización de un nuevo proyecto para seguir mejorando en el conocimiento de las herramientas informáticas aplicadas al campo de la Ingeniería Química.

6.4. Valoración personal

La valoración que extraigo una vez concluido este proyecto es positiva, tanto porque han podido cumplirse los objetivos propuestos como porque la realización de éste me ha permitido poner en práctica conocimientos adquiridos en asignaturas cursadas en la carrera.

Otro aspecto interesante a destacar es el haber aprendido a manejar una herramienta de cálculo, que como hemos dicho, está en auge en el campo de la ingeniería. Actualmente, esta herramienta está tomando una importancia más destacada en el campo de industrias con aplicaciones de Ingeniería Química y Medioambientales ya que éstas pueden ver mejorado su rendimiento a más bajo coste y tiempo.

También me gustaría agradecer al Departamento de Reactores de Ingeniería Química las facilidades de trabajo que me han ofrecido, tanto en los medios técnicos como humanos.



Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mis padres y hermana todo el apoyo recibido durante el desarrollo de este proyecto y sobretodo durante mis años universitarios.

Me gustaría agradecer a mi novio Álex Guerrero todo el apoyo recibido. Sin ninguna duda, sin su ayuda y las fuerzas transmitidas, habría resultado difícil la finalización de este proyecto.

Agradezco también a todas las personas que he conocido durante la carrera, que me han acompañado durante todo estos años, ellos también han tenido que ver en la realización de este proyecto.

Obviamente no podría faltar mi agradecimiento al director de este proyecto Francesc Recasens por la ayuda durante la realización de este trabajo. También deseo agradecer su colaboración a Alfredo Guardo y José Luis Negueruela por su ayuda desinteresada. Así como a los responsables de Fluent por responder de forma satisfactoria a las dudas planteadas.

Finalmente al Departamento de Reactores Químicos de la escuela superior de ingenieros industriales de Barcelona por el soporte técnico prestado y las facilidades proporcionadas para la elaboración de este proyecto.



Bibliografía

Referencias bibliográficas

- [1] DELL, *Product Information Guide*. Dell Desktop Computers.
 - [2] DELL, *Drivers and utilities*. Dell Precision Series System Software.
 - [3] F.PORGES, *Prontuario de calefacción ventilación y aire acondicionado*. Marcombo, Boixareu Editores, 1992. (traducido por Jorge Bagaría Blanxart de 6ª edición inglesa)
 - [4] REDHAT ENTERPRISE LINUX, WS Versión 3. -*Installation CD for the X86 architecture*. -*Documentation CD*. -*Extras CD*. -*Source Code CD*.
 - [5] FLUENT, *Installation Guide for the Fluent Software Products*. Fluent Inc. 31 January 2005.
 - [6] <http://www.fluentusers.com>
 - [7] FLUENT, *License Installation Guide for Fluent Software Products*. Fluent Inc. 31 January 2005.
 - [8] COMSOL, *User Guide Femlab 3.0*. January 2004.
 - [9] ADDLINK SOFTWARE CIENTÍFICO, S.L. *FEMLAB 3.0: Un potente entorno interactivo para la simulación de problemas en ingeniería mediante ecuaciones PDE*. Forum tecnológico. Vol.3.2002.
- Computational Fluid Dynamics Software Fluent:*
- [10] FLUENT, *Fluent 6.2 Documentation*. February 2005.
 - [11] FLUENT, *Fluent 6.2.16 Software*. 16 February 2005.
 - [12] FLUENT, *License Software includes Flexlm 8.3 utilities*. 11 March 2003.
 - [13] GAMBIT, *Gambit 2.2 Documentation*. 7 December 2004.
 - [14] GAMBIT, *Gambit 2.2.30 Software*. 7 December 2004.
 - [15] PORTAL, H.S, MATICE, C.J, FRY TJ, *Computacional Fluid Dynamic: a key analytical tool*. Hydrocarbon Processing. Agosto 2001.
 - [16] JOHN D.ANDERSON, *Computational Fluid Dynamics, the Basics with Applications*. Ed. Mc.Graw Hill 1995.
 - [17] VIVEK V. RANADE, *Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering*, Process Systems Engineering. Ed.Academic Press. Volum 5, 2002.
 - [18] COMSOL, *Modeling guide FEMLAB 3.0*. January 2004.



- [19] FLUENT, *Comprehensive flow Solutions for the Environment*. Fluent, 2005.
- [20] GAMBIT 2.2, *Getting Started Fluent*. September 2004.
- [21] FLUENT 6.2, *Tutorial Guide*, Fluent 2004.
- [22] FLUENT 6.2, *User Guide*, Fluent 2004.
- [23] DANIEL E.ROSNER, *Transport Processes in Chemically reacting Flowsystems*, 2000.
- [24] C. CUVELIER, A.SEGAL and A.A. VAN STEENHOVEN, *Finite Element Method and Navier-Stokes Equations*. Reidel MIA.
- [25] J.M.SMITH, H.C.VAN NESS, M.M.ABBOTT, *Introduction Engineering Thermodynamics*, 5th edition. Mc.Graw-Hill Chemical Engineering series.
- [26] WARK-WARNER. *Contaminación del aire. Origen y Control*. 1997.
- [27] SINCERO & SINCERO, *Environmental Engineering*. Id Id.
- [28] J.C. JONES. *Combustión Science: Principles and practice*. Millennium Book 1993
- [29] IRVIN GLASSMAN, *Combustión. Montajes e Instalaciones*. Noviembre 1995.
- [30] MANUEL MÁRQUEZ MARTÍNEZ, *Combustión y Quemadores*, Marcombo Boixareu editores, 1989.
- [31] C.MARTÍNEZ, P.MUNUERA, A.PÉREZ, A.SALAMERO, J.VILAJOSANA, *Adimistració d'empreses: Transparències*. Edicions UPC. Febrero 2004.
- [32] *Assignatura Projectes i Viabilitat de Negocis*. Asignatura de libre elección UPC.
- [33] CHRISTIAN W.DAWSON, GREGORIO MARTÍN, *El Proyecto Fin de Carrera en Ingeniería Informática, una Guía para estudiantes*. Prentice Hall.
- [34] COMSOL, *Installation Guide Femlab 3*. Versión 3.1. Octubre 2004.
- [35] CARLO PIZZETTI, *Acondicionamiento del aire y Refrigeración, Teoría del Cálculo de las Instalaciones*. 2ª Edición. Madrid 1991.
- [36] F.RAMOS BORJANO, D.TINAUT, *Radiación Solar sobre superficies inclinadas*. Centro de estudios de la Energía Instituto Óptica Daza Valdés, C.S.I.C. Madrid.
- [37] *Reducción de emisiones atmosféricas industriales*. Madrid. Fundación Cotec para la innovación Tecnológica, DL 2000.
- [38] PETER WARNER. *Análisis de Contaminantes del Aire*. Madrid. Paraninfo 1981.
- [39] ÓSCAR ETXEBARRÍA. *Tutorial Ms Project 2003*. Universidad Tecnológica Nacional. <http://www.download.com>



Bibliografía complementaria

- [40] ADDLINK SOFTWARE CIENTÍFICO, S.L. *FEMLAB 3.0: Modelado por elementos finitos con prestaciones nunca vistas*. Forum tecnológico. 5. 2003.
- [41] JOHN C. TANNEHILL, DALE. A. ANDERSON. RICHARD H. PETCHER. *Computacional fluid mechanics and heat transfer*. Ed. Taylor & Francis. 1997.
- [42] C.O. BENNETT, J. E. MAYER. *Transferencia de cantidad de movimiento, calor y material*. Ed. Reverté. 1979.
- [43] BODE J. *Computational fluid dynamics applications in the chemical industry*. Computers & Chemical Engineering, 1994.
- [45] J. MASDEMONT SOLER, *Curs d'elements finites amb aplicació*. Ed. UPC, 2002.
- [46] <http://es.fldp.org/htmls/manuals.html> (Manuales GNU Bison de uso de Linux)
- [47] *Industrial combustion and Directives of the European Community*, 19-21 Junio 1990 Barcelona, Organiza Ins. Petroquímica aplicada UPC y In. Français Pétrole.
- [48] D. BRIAN SPALDING, *Combustión y transferencia de masa*. Compañía Editorial Continental, S.A. de C.V. 1983.
- [49] CARL L.YEWIS, *Chemical Propierties Handbook*. Mc. Graw Hill.
- [50] K.G. DENBIGH, *Teoría del Reactor Químico*. Editorial Alambra S.A. 1968.
- [51] *Combustion Engineering and gas utilisation British gas school fuel management*.
- [52] *Transaction of the ASME*. Enero 1997. Volumen1/9.
- [53] E. MORA. *Contaminación Atmosférica*. Instituto Petroquímica aplicada UPC, 1982
- [54] ROGER PERRY, ROBERT YOUNG, *Handbook of air Pollution analysis*. London. Chapman and Hall, 1977.
- [55] J.CHOMIAK. *Combustion, a study in Theory, Fact and Application*. Energy & Engineering Science Series, 1990.

